Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана

Л. К. Мартинсон, Е. В. Смирнов

МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧ ПО КУРСУ ОБЩЕЙ ФИЗИКИ. РАЗДЕЛ «ИЗМЕРЕНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН В КВАНТОВЫХ СИСТЕМАХ».

Москва, 2002

Содержится краткий обзор основных понятий и соотношений теории, необходимых для решения задач по одному из разделов квантовой механики. Изложена методика решения типовых задач.

ПОСТУЛАТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Квантовая механика принципиально отличается от классической механики в подходе к вопросу о результатах измерения физических величин в квантовых системах. Прежде всего, в квантовой механике физическая величина может иметь дискретный спектр значений, тогда как в классической механике все физические величины изменяются непрерывно. Кроме того, результаты измерения физических величин в квантовой системе имеют вероятностный характер. Это означает, что в общем случае в процессе измерения наблюдаемой физической величины в квантовой системе с определённой вероятностью может реализовываться одно из нескольких возможных значений этой величины. Говорят, что в таком квантовом состоянии физическая величина не имеет определённого значения. В этом случае, зная волновую функцию, мы должны уметь предсказывать среднее значение наблюдаемой физической величины, полученной из ряда измерений.

Такой подход к вопросу о результатах измерения наблюдаемых физических величин в квантовой механике базируется на представлении физических величин операторами и разработке адекватного математического аппарата.

Сформулируем основные постулаты квантовой механики.

I. Каждому состоянию квантовой системы соответствует волновая функция $\Psi(x,y,z,t)$, определяющая это состояние. Волновая функция находится из решения уравнения Шредингера.

II. Каждой наблюдаемой физической величине f в квантовой механике ставится в соответствие некоторый линейный самосопряжённый (эрмитов) оператор $\hat{\boldsymbol{\Phi}}$, действие которого на волновую функцию задаётся при его определении. Соотношения между квантово-механическими операторами аналогичны соотношениям, связывающим в классической механике соответствующие физические величины.

III. Единственным возможным результатом измерения наблюдаемой физической величины f может быть только собственное значение $\boldsymbol{f}_{\mathbf{n}}$ соответствующего ей оператора $\hat{\boldsymbol{\Phi}}$.

Собственные значения оператора $\hat{\boldsymbol{\Phi}}$ находятся из решения уравнения

$$\hat{\Phi}\Psi_n = f_n\Psi_n. \tag{1.1}$$

Это уравнение имеет набор собственных функций $\boldsymbol{\Psi_n}$ и собственных значений $\boldsymbol{f}_{\mathbf{n}}$. Вслучае дискретного спектра физической величины этот набор представляет собой счётное множество (n = 1, 2, …).

Система собственных функций оператора любой физической величины предстовляет собой полную ортонормированную систему функций. Поэтому любую волновую функцию $\boldsymbol{\Psi}$ всегда можно разложить в ряд по этим собственным функциям:

$$\Psi_n = \sum_n C_n\Psi_n, \tag{1.2}$$

причём коэффициенты этого разложения определяются по формуле:

$$C_n = \int_{R^N} \Psi_n^*\Psi\, dV. \tag{1.3}$$

Здесь интегрирование ведётся по всей области $\boldsymbol{R^N}$ изменения пространственных переменных разности $\boldsymbol{N}$. При использовании декартовой системы координат в одномерных задачах $\boldsymbol{dV=dx}$ для $\boldsymbol{N=1}$, в двумерных задачах $\boldsymbol{dV=dxdy}$ для $\boldsymbol{N=2}$ и в трёхмерных задачах $\boldsymbol{dV=dxdydz}$ для $\boldsymbol{N=3}$.

Если для некоторого квантового состояния волновая функция $\boldsymbol{\Psi}$ не является собственной функцией оператора $\hat{\boldsymbol{\Phi}}$, то в этом квантовом состоянии физическая величина $\boldsymbol{f}$ не имеет определенного значения. Вероятность $\boldsymbol{P_n}$ того, что при измерении физической величины $\boldsymbol{f}$ в этом квантовом состоянии будет получено численное значение $\boldsymbol{f_n}$, находится по формуле

$$P_n = \left|C_n\right|^2, \tag{1.4}$$

а среднее значение (математическое ожидание) физической величины по результатам большого числа измерений можно определить как

$$\langle f \rangle = \sum_n P_n f_n = \int_{R^N} \Psi^* (\hat{\Phi}\Psi)\, dV. \tag{1.5}$$

Необходимым и достаточным условием возможности одновременного точного измерения двух физических величин $\boldsymbol{a}$ и $\boldsymbol{b}$ является коммутативность соответствующих им операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$, т. е. выполнение равенства

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0. \tag{1.6}$$

Если же коммутатор $\left[\hat{A},\hat{B}\right]$ двух операторов не равен нулю, то соответствующие им две физические величины не могут быть измерены одновременно точно. Для таких физических величин справедливы соотношения неопределенностей вида $\Delta\boldsymbol{a}\cdot\Delta\boldsymbol{b}>0$ утверждающие, что обе неопределенности $\Delta\boldsymbol{a}$ и $\Delta\boldsymbol{b}$ не могут одновременно стремиться к нулю.

2. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН ОПЕРАТОРАМИ

Приведем выражения для операторов основных физических величин квантовой механики:

Операторы координат. Действие этих операторов на волновую функцию сводится к умножению ее на координату. В операторной форме это можно записать в виде равенств

$$\hat{x} = x, \hat{y} = y, \hat{z} = z. \tag{2.1}$$

Отметим, что операторами умножения на соответствующие координаты являются также операторы координат в цилиндрической и сферической системах координат.

Операторы проекций импульса. Эти операторы связаны с дифференцированием по соответствующим координатам, причем

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}. \tag{2.2}$$

Используя известное соотношение классической механики, можно построить оператор квадрата импульса по правилу

$$\hat{p}^2 = \left(\hat{p}_x\right)^2 + \left(\hat{p}_y\right)^2 + \left(\hat{p}_z\right)^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right), \tag{2.3}$$

или, используя оператор Лапласа,

$$\hat{p}^2 = -\hbar^2\Delta \tag{2.4}$$

Операторы проекций момента импульса. Используя классическую формулу для момента импульса материальной точки $\vec{L} = [\vec{r}, \vec{p}],$ можно построить операторы проекций момента импульса по правилам

$$\begin{aligned}
\hat{L}_x &= \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right),\\
\hat{L}_y &= \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right),\\
\hat{L}_z &= \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right).
\end{aligned} \tag{2.5}$$

В сферической системе координат

$$\begin{aligned}
\hat{L}_x &= -i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + ctg\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),\\
\hat{L}_y &= -i\hbar\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - ctg\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),\\
\hat{L}_z &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}.
\end{aligned} \tag{2.6}$$

Оператор $\hat{L}_z$ имеет дискретный спектр собственных значений:

$$L_z = m\hbar, \text{ где } m = 0, \pm 1, \pm 2, ..., \tag{2.7}$$

каждому из которых соответствует собственная функция

$$\Psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}. \qquad (2.8)$$

Эти собственные функции ортонормированы, так что

$$\int_0^{2\pi} \Psi_m^*(\varphi)\Psi_n(\varphi)d\varphi = \begin{cases} 1, & если\ n = m \\ 0, & если\ n \neq m. \end{cases}$$

Оператор квадрата момента импульса $\hat{L}^2$ определяется выражением

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \left\{ \left(z\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial z} \right)^2 + \left(x\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial x} \right)^2 + \left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y} \right)^2 \right\}. \qquad (2.9)$$

В сферической системе координат оператор Лапласа

$$\Delta = \Delta_r + \frac{1}{r^2}\Delta_{\theta,\varphi}$$

может быть записан с выделением его радиальной части:

$$\Delta_r = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$$

и угловой части:

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

В таких обозначениях оператор квадрата момента импульса в сферической системе координат преобразуется к виду

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\Delta_{\theta,\varphi}. \qquad (2.10)$$

Спектр собственных значений оператора $\hat{L}^2$ является дискретным

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1), l = 0,1,2,..., \qquad (2.11)$$

причем каждому собственному значению с заданным значением l соответствует ($2l$+1) собственных функций $\Psi_{l,m} = Y_{l,m}(\theta,\varphi)$, отличающихся значениями целочисленного параметра m=0, ±1,±2, ..., ±l. Каждому значению т соответствуют определенные значения проекции момента импульса L_z, которые выражаются формулой (2.7).

Функции $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$ называются шаровыми (или сферическими) функциями. Приведем явный вид нескольких первых нормированных сферических функций:

$$Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta, Y_{1,\pm 1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\varphi} \qquad (2.12)$$

Эти функции нормированы условием

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} Y_{l,m}^* Y_{l,m} \sin\theta d\theta d\varphi = 1.$$

Операторы энергий.

Оператор кинетической энергии определим, пользуясь классической формулой связи кинетической энергии частицы массой m_0 и ее квадрата импульса: $E_к = \dfrac{p^2}{2m_0}$.

Аналогичное соотношение связывает операторы в квантовой механике. Поэтому, с учетом (2.4), получаем

$$\hat{E}_\kappa = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} = \frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta. \tag{2.13}$$

Оператор потенциальной энергии представляет собой оператор умножения на функцию *U=U(x,y,z)*, определяющую потенциальную энергию частицы в стационарном силовом поле, т. е.

$$\hat{U} = U(x,y,z). \tag{2.14}$$

Оператор полной энергии в квантовой механике называют оператором функции Гамильтона или просто гамильтонианом. Гамильтониан $\hat{H}$ определяется как сумма операторов кинетической и потенциальной энергий и имеет вид

$$\hat{H} = \hat{E}_\kappa + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta + U(x,y,z). \tag{2.15}$$

Выражение (2.15) можно использовать и в случае нестационарных силовых полей, понимая под $\hat{U} = U(x,y,z,t)$ силовую функцию, связанную с силой, действующей на частицу, соотношением $\vec{F} = -\nabla U$.

3. ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ.

Задача 1. Докажите, что оператор проекции импульса $\hat{p}_x$ является линейньм самосопряженным (эрмитовым) оператором.

Решение. Линейность оператора $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \equiv \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ очевидна, поскольку дифференцирование является линейной операцией. Покажем, что оператор $\hat{p}_x$ является эрмитовым оператором, т. е. для него выполняется условие самосопряженности

$$\int_{R^N} \Psi_1^*(\hat{p}_x\Psi_2)dV = \int_{R^N} \Psi_2(\hat{p}_x\Psi_1)^* dV. \tag{3.1}$$

Здесь Ψ_1 и Ψ_2 - две произвольные функции, для которых выполнены все условия, накладываемые на волновые функции. В частности, эти функции должны обращаться в нуль вместе с производными на границе рассматриваемой области.
Для упрощения выкладок ограничимся рассмотрением одномерного случая, когда функции Ψ_1 и Ψ_2 зависят только от одной пространственной координаты *x*. Тогда имеем

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^*(\hat{p}_x\Psi_2)dx = \frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^*\frac{\partial\Psi_2}{\partial x}dx = \frac{\hbar}{i}\Psi_1^*\Psi_2\Big|_{-\infty}^{+\infty} + i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_2\frac{\partial\Psi_1^*}{\partial x}dx.$$

Поскольку, согласно условию, $\Psi_1(\pm\infty)=\Psi_2(\pm\infty)=0$, то

$$I = i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_2\frac{\partial\Psi_1^*}{\partial x}dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_2\left(i\hbar\frac{\partial\Psi_1^*}{\partial x}\right)dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_2\left(-i\hbar\frac{\partial\Psi_1}{\partial x}\right)^* dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_2(\hat{p}_x\Psi_1)^* dx.$$

Таким образом, показано выполнение условия самосопряженности

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^*(\hat{p}_x\Psi_2)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2(\hat{p}_x\Psi_1)^* dx$$

для оператора проекции импульса.

Задача 2. Стационарное квантовое состояние частицы массой m_0, движущейся в одномерной потенциальной яме шириной a с абсолютно непроницаемыми стенками, описывается волновой функцией

$$\Psi_n(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi x}{a}, & 0<x<a\\ 0, & x<0, x>a,\end{cases} \tag{3.2}$$

где n=1, 2,... - квантовое число, определяющее состояние частицы.
Определите: а) среднее значение координаты частицы $<x>$; б) среднее значение проекции импульса $<p_x>$ и в) среднее значение квадрата импульса частицы $<p^2>$.

Решение. а) Согласно (1.5), учитывая, что $\Psi_n^*=\Psi_n$, находим

$$\langle x\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_n^*(x)\{\hat{x}\Psi_n(x)\}dx=\int_0^a\Psi_n(x)\cdot x\cdot\Psi_n(x)dx.$$

Подставляя выражение для волновой функции частицы (3.2), получаем

$$\langle x\rangle=\frac{2}{a}\int_0^a x\sin^2\frac{n\pi x}{a}dx=\frac{1}{a}\int_0^a x\left(1-\cos\frac{2n\pi x}{a}\right)dx=\frac{a}{2}.$$

Этот результат физически достаточно очевиден. Частица движется в пространстве между непроницаемыми стенками ямы (x = 0 и x = a), отражаясь от них. Поэтому среднее значение координаты частицы должно соответствовать центру ямы.

б) Аналогично, используя выражение (2.2) для оператора $\hat{p}_x$, находим среднее значение проекции импульса

$$\langle p_x\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_n^*(x)\{\hat{p}_x\Psi_n(x)\}dx=\int_0^a\Psi_n(x)\left\{\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi_n}{\partial x}\right\}dx=$$

$$=\frac{\hbar}{2i}\int_0^a\frac{\partial\Psi_n^2}{\partial x}dx=\frac{\hbar}{ia}\sin^2\frac{n\pi x}{a}\bigg|_0^a=0$$

Отметим, что значение $<p_x>$=0 для частицы в яме получается и в классической механике. Для классической частицы этот результат очевиден, так как частица движется вдоль оси x, отражаясь от стенок ямы, а ее импульс направлен то в одну, то в другую, противоположную, сторону. Поэтому среднее значение проекции импульса частицы на ось x оказывается равным нулю.

в) Найдем теперь среднее значение квадрата импульса $<p^2>$.
Поскольку мы имеем дело с одномерным случаем, из (2.3) следует, что

$$\hat{p}^2=\hat{p}_x^2=-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}.$$

Очевидно, что, хотя среднее значение проекции импульса $<p_x>$ равно нулю, среднее значение квадрата импульса $<p^2>$ у движущейся частицы должно быть отличным от нуля. Какое же в среднем значение квадрата импульса будет получено в серии измерений? Согласно (1.5),

$$\left\langle p^2 \right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^*(x)\{\hat{p}^2 \Psi n(x)\} dx = -\frac{2\hbar^2}{a} \int_0^a \sin\frac{n\pi x}{a} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\sin\frac{n\pi x}{a} \right) dx =$$

$$= \frac{2\hbar^2}{a} \frac{n^2\pi^2}{a^2} \int_0^a \sin^2\frac{n\pi x}{a} dx = \frac{2\hbar^2}{a} \frac{n^2\pi^2}{a^2} \frac{a}{2}.$$

Таким образом, в состоянии частицы с квантовым числом n

$$\left\langle p^2 \right\rangle = \frac{\pi^2\hbar^2}{a^2} n^2.$$

В том, что значение $<p^2>$ найдено правильно, можно убедиться и другим способом. Действительно, покажем, что волновая функция (3.2) является собственной функцией оператора $\hat{p}^2$. Подействовав на неё оператором квадрата импульса

$$\hat{p}_x^2 \Psi_n(x) = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\sqrt{\frac{2}{a}} \sin\frac{n\pi x}{a^2} \right) = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{a^2} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\frac{n\pi x}{a} = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{a^2} \Psi_n(x),$$

мы получим в результате такого действия ту же волновую функцию, умноженную на некоторое число $\frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{a^2}$, которое является собственным значением оператора квадрата импульса.

Согласно общим положениям квантовой механики, этот результат показывает, что в квантовых состояниях, описываемых волновыми функциями (3.2), при любых значениях n квадрат импульса частицы имеет определенное значение, равное соответствующему собственному значению оператора $\hat{p}^2$. Поэтому при измерении $\hat{p}^2$ всегда будет получаться одно и то же значение

$$p^2 = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{a^2}.$$

Следовательно, эта же величина определит и среднее значение квадрата импульса в серии измерений, то есть

$$\left\langle p^2 \right\rangle = \frac{\pi^2\hbar^2}{a^2} n^2.$$

Задача 3. Частица в некоторый момент времени находится в состоянии, описываемом волновой функцией, координатная часть которой имеет вид

$$\Psi(x) = A\exp\left(-\frac{x^2}{a^2} + ikx \right), \quad -\infty < x < +\infty, \tag{3.3}$$

где A и a - некоторые постоянные; а k - заданный параметр, имеющий размерность обратной длины. Определите среднее значение проекции импульса $<p_x>$ частицы в этом состоянии.

Решение. Так как для волновой функции (3.3)

$$\hat{p}_x \Psi = -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} = \left(k\hbar + i\frac{2\hbar}{a^2} x \right) \Psi(x),$$

по правилу (1.5) нахождения среднего значения имеем

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x)\{\hat{p}_x \Psi(x)\}dx = k\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x)\Psi(x)dx + i\frac{2\hbar}{a^2}\int_{-\infty}^{+\infty} x\Psi^*(x)\Psi(x)dx = k\hbar I_1 + i\frac{2\hbar}{a^2} I_2.$$

Из условия нормировки волновой функции

$$I_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x)\Psi(x)dx = 1.$$

Во втором интеграле подынтегральная функция является нечетной функцией координаты x, а интегрирование проводится в симметричных пределах от $-\infty$ до $+\infty$. Поэтому этот интеграл равен нулю, т. е.

$$I_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} x\Psi^*(x)\Psi(x)dx = A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x \exp\left(-\frac{2x^2}{a^2}\right)dx = 0.$$

Окончательно находим отличное от нуля среднее значение проекции импульса частицы

$$\langle p_x \rangle = k\hbar.$$

Задача 4. Найдите среднее значение потенциальной энергии квантового осциллятора с частотой ω_0 в первом возбужденном состоянии, описываемом волновой функцией

$$\Psi(x) = Ax \exp\left(-\frac{m_0\omega_0 x^2}{2\hbar}\right), \quad -\infty < x < +\infty. \tag{3.4}$$

Здесь А — некоторая нормировочная постоянная; m_0 - масса частицы.

Решение. Так как потенциальная энергия осциллятора

$$U(x) = \frac{kx^2}{2} = \frac{m_0\omega_0 x^2}{2},$$

в соответствии с (1.5) и (2.14) среднее значение потенциальной энергии осциллятора находим по формуле

$$\langle U \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x)\{\hat{U}\Psi(x)\}dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x)U(x)\Psi(x)dx =$$

$$= \frac{m_0 \cdot \omega_0^2}{2}\int_{-\infty}^{+\infty} A^2 x^4 \exp\left(-\frac{m_0\omega_0 x^2}{\hbar}\right)dx.$$

Проинтегрировав один раз по частям, получаем

$$\langle U \rangle = \frac{m_0\omega_0^2}{2}\frac{\hbar}{2m_0 \cdot \omega_0} 3\int_{-\infty}^{+\infty} A^2 x^2 \exp\left(-\frac{m_0\omega_0 x^2}{\hbar}\right)dx.$$

Так как по условию нормировки волновой функции

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} A^2 x^2 \exp\left(-\frac{m_0\omega_0 x^2}{\hbar}\right)dx = 1,$$

для средней потенциальной энергии осциллятора окончательно получаем

$$\langle U \rangle = \frac{3}{4}\hbar\omega_0.$$

Правилъность полученного результата можно обосновать следующим образом. Как и при гармонических колебаниях классического осциллятора, средняя потенциальная энергия квантового осциллятора равна его средней кинетической энергии, а их сумма составляет полную энергию осциллятора.

В квантовой механике полная энергия осциллятора определяется известной формулой

$$E_n = \hbar\omega_0\left(n+\frac{1}{2}\right), \quad n = 0, \quad 1, \quad 2,\dots$$

Для первого возбужденного состояния (n=1) полная энергия осциллятора $E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega_0$. Тогда для средней потенциальной энергии такого квантового осциллятора получаем значения

$$\langle U\rangle = \frac{1}{2}E_1 = \frac{3}{4}\hbar\omega_0.$$

Задача 5. В основном состоянии атома водорода волновая функция электрона имеет вид

$$\Psi(r) = A\exp\left(-\frac{r}{r_1}\right), \quad 0 \le r \le \infty, \tag{3.5}$$

где A - нормировочная константа; r_1 - значение боровского радиуса. Найдите для этого состояния средние значения: а) модуля кулоновской силы, действующей на электрон; б) потенциальной энергии взаимодействия электрона с ядром; в) кинетической энергии движущегося электрона.

Решение. Константу A найдем из условия нормировки волновой функции, которое в сферической системе координат запишется в виде

$$A^2\int_0^\infty \exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right)4\pi r^2 dr = 1.$$

Отсюда

$$4\pi A^2\left(\frac{r_1}{2}\right)^3\int_0^\infty \xi^2 e^{-\xi}d\xi = 1.$$

Интегрируя по частям, находим

$$I = \int_0^\infty \xi^2 e^{-\xi}d\xi = 2\int_0^\infty \xi e^{-\xi}d\xi = 2\int_0^\infty e^{-\xi}d\xi = 2$$

и вычисляем нормировочную константу

$$A = -\frac{1}{\sqrt{\pi r_1^3}}.$$

а) В сферической системе координат модуль кулоновской силы зависит от расстояния r электрона до ядра, причем

$$F(r) = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}.$$

Оператор модуля кулоновской силы $\hat{F}_K$ есть оператор умножения на функцию $F(r)$.

Среднее значение модуля кулоновской силы вычисляем по формуле (1.15):

$$\langle F\rangle=\int_0^\infty \Psi^*(r)\{\hat{F}_K\Psi(r)\}4\pi r^2dr=\int_0^\infty \Psi(r)F(r)\Psi(r)4\pi r^2dr=$$

$$=\frac{e^2}{\varepsilon_0}\int_0^\infty A^2\exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right)dr=\frac{e^2}{\pi\varepsilon_0 r_1^3}\left(\frac{r_1}{2}\right)\int_0^\infty e^{-\xi}d\xi=\frac{e^2}{2\pi\varepsilon_0 r_1^2}.$$

б) Потенциальная энергия электрона в поле ядра

$$U(r)=-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r},$$

а оператор потенциальной энергии есть оператор умножения на функцию $U(r)$. Поэтому

$$\langle U\rangle=\int_0^\infty \Psi^*(r)\{\hat{U}\Psi(r)\}4\pi r^2dr=\int_0^\infty \Psi(r)U(r)\Psi(r)dr=-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}I_1.$$

Здесь

$$I_1=\int_0^\infty A^2\frac{1}{r}\exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right)4\pi r^2dr=\frac{4\pi}{\pi r_1^3}\left(\frac{r_1}{2}\right)^2\int_0^\infty \xi e^{-\xi}d\xi=\frac{1}{r_1}.$$

Таким образом, среднее значение потенциальной энергии электрона в основном состоянии атома водорода

$$\langle U\rangle=-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_1}.$$

в) В сферической системе координат для волновой функции (3.5)

$$\hat{E}_K\Psi=-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\Psi=-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\Psi}{dr}\right)=\frac{\hbar^2}{2m_0r_1}\left(\frac{2}{r}-\frac{1}{r_1}\right)A\exp\left(-\frac{r}{r_1}\right),$$

где m_0 - масса электрона.

Поэтому, вычисляя среднее значение кинетической энергии электрона по формуле (1.15), получаем

$$\langle E_K\rangle=\int_0^\infty \Psi^*(r)\{\hat{E}_\kappa\Psi(r)\}4\pi r^2dr=\frac{\hbar^2}{m_0r_1}\int_0^\infty A^2\frac{1}{r}\exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right)4\pi r^2dr-$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0r_1^2}\int_0^\infty A^2\exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right)4\pi r^2dr=\frac{\hbar^2}{m_0r_1}I_1-\frac{\hbar^2}{2m_0r_1^2}I_2.$$

Первый интеграл I_1 был вычислен в пункте б), причем $I_1=1/r_1$. Второй интеграл $I_2=1$ в силу условия нормировки волновой функции (3.5). Следовательно, среднее значение кинетической энергии электрона

$$\langle E\kappa\rangle=\frac{\hbar^2}{m_0r_1^2}-\frac{\hbar^2}{2m_0r_1^2}=\frac{\hbar^2}{2m_0r_1^2}.$$

Для проверки найденных значений $<U>$ и $<E_K>$ заметим, что их сумма должна быть равна полной энергии электрона в основном состоянии атома водорода:

$$E_1=-\frac{m_0e^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}.$$

Если учесть, что боровский радиус

$$r_1 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_0 e^2},$$

для полученных значений $<U>$ и $<E_K>$ действительно имеет место равенство

$$\langle U \rangle + \langle E_K \rangle = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_1} + \frac{\hbar^2}{2m_0 r_1^2} = -\frac{m_0 e^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2} = E_1.$$

Задача 6. Определите возможные результаты измерений квадрата модуля момента импульса L^2 и его проекции L_z на выделенное направление для частицы, находящейся в состоянии, описываемом волновой функцией

$$\Psi(\theta,\varphi) = A\sin\theta\cos\varphi, \quad (3.6)$$

где θ - полярный угол; φ - азимутальный угол; A - некоторая нормировочная постоянная.

Решение. В сферической системе координат уравнение Шредингера допускает разделение переменных. В этом случае оказывается возможным исследовать зависимость волновой функции от угловых переменных, отвлекаясь от ее зависимости от радиальной переменной. Именно такой случай рассматривается в этой задаче.

Условие нормировки для волновой функции Ψ(θ,φ) имеет вид

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \Psi^*(\theta,\varphi)\Psi(\theta,\varphi)\sin\theta d\theta d\varphi = 1.$$

Подставляя в эту формулу волновую функцию вида (3.6), получаем

$$A^2\int_0^{2\pi}\cos^2\varphi d\varphi\int_0^{\pi}\sin^3\theta d\theta = 1.$$

Поскольку

$$\int_0^{2\pi}\cos^2\varphi d\varphi = \pi, \qquad a\int_0^{\pi}\sin^3\theta d\theta = \frac{4}{3},$$

для константы A получаем $A = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}$.

Используя формулу Эйлера, представим cosφ в комплексной форме:

$$\cos\varphi = \frac{1}{2}(e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}).$$

Тогда нормированную волновую функцию (3.6) можно записать в виде разложения в ряд по собственным функциям (2.12) оператора $\hat{L}^2$:

$$\Psi(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sin\theta\left(\frac{1}{2}e^{i\varphi} + \frac{1}{2}e^{-i\varphi}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{i\varphi} +$$

$$+\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{-i\varphi} = \frac{1}{\sqrt{2}}Y_{1,+1}(\theta,\varphi) + \frac{1}{\sqrt{2}}Y_{1,-1}(\theta,\varphi).$$

Поскольку в этом разложении присутствуют только собственные функции оператора $\hat{L}^2$, отвечающие значениям l=1, с учетом (2.11) это означает, что результатом измерения квадрата момента импульса всегда будет одно и то же значение $L^2 = 2\hbar^2$. Для модуля момента в результате измерения получим $L = \sqrt{2}\hbar$. Однако два слагаемых в найденном разложении отличаются значениями $m = +1$ и $m = -1$. Следовательно, при измерении проекции момента импульса частицы, находящейся в рассматриваемом квантовом состоянии, будут реализовываться два значения

$$L_z = +\hbar \text{ и } L_z = -\hbar.$$

Эти значения при измерениях будут получаться с вероятностями, которые определяются квадратами модулей коэффициентов C_1 и C_2; в разложении волновой функции в ряд по собственным функциям оператора $\hat{L}^2$. Так как в нашем случае $C_1 = C_2 = \dfrac{1}{\sqrt{2}}$, эти вероятности одинаковы и равны

$$P(+\hbar) = \frac{1}{2} \text{ и } P(-\hbar) = \frac{1}{2}.$$

Среднее значение результатов измерения L_z при этом будет равно нулю, так как

$$\langle L_z \rangle = P(+\hbar)\hbar + P(-\hbar)(-\hbar) = \frac{1}{2}\hbar - \frac{1}{2}\hbar = 0.$$

Этот результат можно получить и формальным вычислением по формуле (1.5). Действительно,

$$\hat{L}_z \Psi = -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} = i\hbar A \sin\theta \sin\varphi,$$

поэтому

$$\langle L_z \rangle = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \Psi^*(\theta,\varphi)\{\hat{L}_z \Psi(\theta,\varphi)\} \sin\theta \, d\theta \, d\varphi =$$

$$= i\hbar A^2 \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \sin^3\theta \sin\varphi \cos\varphi \, d\theta \, d\varphi = \frac{i\hbar A^2}{2} \int_0^{\pi} \sin^3\theta \, d\theta \int_0^{2\pi} \sin 2\varphi \, d\varphi.$$

Второй интеграл в полученном соотношении равен нулю, следовательно, и $\langle L_z \rangle = 0$.

Задача 7. Покажите, что операторы проекций момента импульса связаны коммутационным соотношением

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z. \tag{3.7}$$

Решение. Коммутатор операторов $\hat{L}_x$ и $\hat{L}_y$ имеет вид

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_z.$$

С учетом явного вида операторов (2.5) имеем

$$[\hat{L}_x,\hat{L}_y]=-\hbar^2\left\{\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right)-\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right)\right\}=$$

$$=-\hbar^2\left\{y\frac{\partial}{\partial x}+yz\frac{\partial^2}{\partial z\partial x}-yx\frac{\partial^2}{\partial z^2}-z^2\frac{\partial^2}{\partial y\partial x}+zx\frac{\partial^2}{\partial y\partial z}-zy\frac{\partial^2}{\partial x\partial z}+\right.$$

$$\left.+z^2\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}+xy\frac{\partial^2}{\partial z^2}-x\frac{\partial}{\partial y}-xz\frac{\partial^2}{\partial z\partial y}\right\}=$$

$$=-\hbar^2\left(y\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial y}\right)=i\hbar\hat{L}_z.$$

Точно так же можно получить коммутационные соотношения для других пар операторов проекций момента импульса:

$$[\hat{L}_y,\hat{L}_z]=i\hbar\hat{L}_x,\quad [\hat{L}_z,\hat{L}_x]=i\hbar\hat{L}_y.$$

Отсюда следует вывод: три проекции момента импульса L_x, L_y, L_z не могут быть одновременно точно измерены.

Задача 8. Докажите, что оператор квадрата момента импульса $\hat{L}^2$ коммутирует с операторами $\hat{L}_x, \hat{L}_y$ и $\hat{L}_z$.

Решение. По определению оператора $\hat{L}^2$,

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

Следовательно,

$$[\hat{L}^2,\hat{L}_x]=[\hat{L}_x^2,\hat{L}_x]+[\hat{L}_y^2,\hat{L}_x]+[\hat{L}_z^2,\hat{L}_x]. \tag{3.8}$$

Для первого слагаемого в (3.8) находим

$$[\hat{L}_x^2,\hat{L}_x]=\hat{L}_x^2\hat{L}_x-\hat{L}_x\hat{L}_x^2=\hat{L}_x^3-\hat{L}_x^3=0.$$

Второе и третье слагаемые в (3.8) преобразуем, воспользовавшись коммутационными соотношениями, полученными в задаче 7:

$$[\hat{L}_y,\hat{L}_x]=-i\hbar\hat{L}_z,[\hat{L}_z,\hat{L}_x]=i\hbar\hat{L}_y.$$

С учетом этих соотношений

$$[\hat{L}_y^2,\hat{L}_x]=\hat{L}_y^2\hat{L}_x-\hat{L}_x\hat{L}_y^2=\hat{L}_y\hat{L}_y\hat{L}_x-\hat{L}_y\hat{L}_x\hat{L}_y+\hat{L}_y\hat{L}_x\hat{L}_y-\hat{L}_x\hat{L}_y\hat{L}_y=$$

$$=\hat{L}_y[\hat{L}_y,\hat{L}_x]+[\hat{L}_y,\hat{L}_x]\hat{L}_y=-i\hbar(\hat{L}_y\hat{L}_z+\hat{L}_z\hat{L}_y),$$

$$[\hat{L}_z^2,\hat{L}_x]=\hat{L}_z^2\hat{L}_x-\hat{L}_x\hat{L}_z^2=\hat{L}_z\hat{L}_z\hat{L}_x-\hat{L}_z\hat{L}_x\hat{L}_z+\hat{L}_z\hat{L}_x\hat{L}_z-\hat{L}_x\hat{L}_z\hat{L}_z=$$

$$=\hat{L}_z[\hat{L}_z,\hat{L}_x]+[\hat{L}_z,\hat{L}_x]\hat{L}_z=i\hbar(\hat{L}_z\hat{L}_y+\hat{L}_y\hat{L}_z).$$

Подставляя полученные выражения в (3.8), получаем

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

т. е. оператор $\hat{L}^2$ коммутирует с оператором $\hat{L}_x$.

Аналогично доказывается коммутативность оператора $\hat{L}^2$ с операторами $\hat{L}_y$ и $\hat{L}_z$.

Таким образом, мы доказали, что квадрат момента импульса может быть одновременно точно измерен только с одной из его проекций.

Задача 9. Докажите, что оператор квадрата импульса $\hat{p}^2$ коммутирует с оператором квадрата момента импульса $\hat{L}^2$.

Решение. В сферической системе координат

$$\hat{p}^2 = -\hbar^2 \Delta = -\hbar^2 \left(\Delta_r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta,\varphi} \right),$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\theta,\varphi},$$

поэтому

$$[\hat{p}^2, \hat{L}^2] = \hbar^4 \left\{ [\Delta_r, \Delta_{\theta,\varphi}] + \frac{1}{r^2} [\Delta_{\theta,\varphi}, \Delta_{\theta,\varphi}] \right\}.$$

В этом выражении коммутатор $[\Delta_{\theta,\varphi}, \Delta_{\theta,\varphi}] = \Delta^2_{\theta,\varphi} - \Delta^2_{\theta,\varphi} = 0.$ Равен нулю и коммутатор $[\Delta_r, \Delta_{\theta,\varphi}]$. Действительно, $[\Delta_r, \Delta_{\theta,\varphi}] = \Delta_r \Delta_{\theta,\varphi} - \Delta_{\theta,\varphi} \Delta_r = 0,$ поскольку операторы Δ_r и $\Delta_{\theta,\varphi}$ содержат дифференциальные операции по разным переменным, и результат их последовательного действия на волновую функцию не зависит от порядка их следования. Тем самым мы доказали, что $[\hat{p}^2, \hat{L}^2] = 0$. Равенство нулю этого коммутатора означает, что квадрат импульса и квадрат момента импульса могут быть измерены одновременно точно.

СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Врунов П.А., Мартинсон Л.К., Смирнов Е.В. Операторы в квантовой механике. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э.Баумана, 1994. 40с.
2. Чертов А.Г., Воробьев А.А. Задачник по физике. М.: Высш. шк., 1988. 527 с.
3. Иродов И.Е. Задачи по общей физике. М.: ЗАО «Изд-во БИНОМ». 1998. 448 с.
4. Иродов И.Е. Задачи по квантовой физике. М.: Высш. шк., 1991. 175 с.
5. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. М.: Высш. шк., 1961. 512 с.
6. Ландау Л. Д., Лифшиц Е.М. Краткий курс теоретической физики. Кн. 2; Квантовая механика. М.: Наука, 1972. 367 с.