Московский Государственный университет им. М.В. Ломоносова

Физика - Задачи

Выполнили:

Ботвиновский Е

Гирча А

Горелов С

Москва, 2004

Содержание

1 Задача

Состояние свободной частицы при $t = 0$ имеет вид: $\psi(0, x) = A\exp(-x^2/2a^2 + ik_0x)$. Найти при $t > 0$ средние значения $\langle x\rangle$, $\langle p_x\rangle$, $\langle(x - \langle x\rangle)^2\rangle$, $\langle(p_x - \langle p_x\rangle)^2\rangle$.

Решение

Общее решение одномерного уравнения Шредингера для свободной частицы имеет вид

$$\psi(t, x) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega t + ikx} C(k) dk, \tag{1.1}$$

где $\omega = \dfrac{\hbar k^2}{2m}$.

Из условия задачи следует, что

$$\psi(0, x) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} C(k) dk, \tag{1.2}$$

Из преобразования Фурье следует тождество

$$\frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \psi(0, x) e^{-ipx} dx = C(p). \tag{1.3}$$

Вычислим интеграл в левой части. Положим $x = z - b$, где $b = -ia^2(k_0 - p)$. Тогда

$$\frac{A}{(2\pi)^{1/2}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0x - ipx\right\} dx = \frac{A}{(2\pi)^{1/2}} \exp\left\{-\frac{a^2(k_0 - p)^2}{2}\right\} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{-\frac{z^2}{2a^2}\right\} dz =$$

$$= \frac{Aa}{\pi^{1/2}} \exp\left\{-\frac{a^2(k_0 - p)^2}{2}\right\} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} dy. \tag{1.4}$$

Вычислим интеграл $I = \displaystyle\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} dy$.

$$I^2 = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} dy \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx = \int\limits_{-\infty}^{+\infty}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x^2+y^2)} dx dy = \int\limits_{0}^{2\pi} d\phi \int\limits_{0}^{+\infty} \rho d\rho e^{-\rho^2} = \pi. \tag{1.5}$$

Таким образом, $I = \sqrt{\pi}$.

Итак, получаем, что

$$C(p) = aA\exp\left\{-\frac{(p - k_0)^2 a^2}{2}\right\}. \tag{1.6}$$

Подставляя полученное выражение в (1.1) и интегрируя получаем

$$\psi(t, x) = \frac{A}{\sqrt{1 + \dfrac{i\hbar t}{ma^2}}} \exp\left\{-\frac{x^2 - 2ia^2k_0x + \dfrac{i\hbar k_0^2 a^2 t}{m}}{2a^2\left(1 + \dfrac{i\hbar t}{ma^2}\right)}\right\}. \tag{1.7}$$

Найдем A.

$$|\psi|^2 = \frac{A^2}{\sqrt{1+\left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2}} \exp\left\{-\frac{\left(x-\frac{\hbar k_0 t}{m}\right)^2}{a^2\left(1+\left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2\right)}\right\} \tag{1.8}$$

Пусть

$$z = x - \frac{\hbar k_0 t}{m}, \quad f = \sqrt{1+\left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2}, \quad y = \frac{z}{af}. \tag{1.9}$$

Тогда

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{A^2}{\sqrt{1+\left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2}} \exp\left\{-\frac{\left(x-\frac{\hbar k_0 t}{m}\right)^2}{a^2\left(1+\left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2\right)}\right\} = \tag{1.10}$$

$$= \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{A^2}{f} \exp\left\{-\frac{z^2}{a^2 f^2}\right\} dz = aA^2 \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy = \sqrt{\pi} a A^2 = 1.$$

Отсюда $A = \dfrac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{a}}$.

Теперь вычислим величины $\langle p_x \rangle$, $\langle x \rangle$ и $\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$, $\langle (p_x - \langle p_x \rangle)^2 \rangle$.

$$\partial_x \psi = \left(\frac{-x + ia^2 k_0}{a^2\left(1+\frac{i\hbar t}{ma^2}\right)}\right) \frac{A}{\sqrt{1+\frac{i\hbar t}{ma^2}}} \exp\left\{-\frac{x^2 - 2ia^2 k_0 x + \frac{i\hbar k_0^2 a^2 t}{m}}{2a^2\left(1+\frac{i\hbar t}{ma^2}\right)}\right\}. \tag{1.11}$$

$$p_x \psi = -i\hbar \partial_x \psi = \hbar \frac{i\left(x - \frac{\hbar k_0 t}{m}\right) + i\frac{\hbar k_0 t}{m} + a^2 k_0}{a^2\left(1+\frac{i\hbar t}{ma^2}\right)} \psi = \left\{\frac{iz\hbar}{a^2\left(1+\frac{i\hbar t}{ma^2}\right)} + \hbar k_0\right\} \psi. \tag{1.12}$$

$$(p_x \psi)^* = i\hbar \partial_x \psi^* = \hbar \frac{-i\left(x - \frac{\hbar k_0 t}{m}\right) - i\frac{\hbar k_0 t}{m} + a^2 k_0}{a^2\left(1-\frac{i\hbar t}{ma^2}\right)} \psi = \left\{\frac{-iz\hbar}{a^2\left(1-\frac{i\hbar t}{ma^2}\right)} + \hbar k_0\right\} \psi^*. \tag{1.13}$$

$$\langle x \rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} x |\psi|^2 dx = \int \left(z + \frac{\hbar k_0}{m} t\right) |\psi|^2 dz = \frac{\hbar k_0 t}{m} = \frac{p_0 t}{m} = vt, \tag{1.14}$$

поскольку функция $z|\psi|^2$ является нечетной относительно переменной z.

$$\langle p_x \rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \psi^* p_x \psi dx = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{iz\hbar}{a^2\left(1+\frac{i\hbar t}{ma^2}\right)} + \hbar k_0\right) |\psi|^2 dz = \hbar k_0 = p_0. \tag{1.15}$$

$$\langle x^2\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} x^2|\psi|^2 dx = \int\limits_{-\infty}^{\infty}\left(z+\frac{\hbar k_0 t}{m}\right)^2|\psi|^2 dz = \int\limits_{-\infty}^{\infty}\left(z^2+2z\frac{\hbar k_0 t}{m}+\left(\frac{\hbar k_0 t}{m}\right)^2\right)|\psi^2|dz =$$

$$= \left(\frac{\hbar k_0 t}{m}\right)^2 + \frac{A^2}{f}\int\limits_{-\infty}^{\infty} z^2 e^{-\frac{z^2}{a^2 f^2}}dz = \left(\frac{\hbar k_0 t}{m}\right)^2 + a^3 f^2 A^2\int\limits_{-\infty}^{\infty} y^2 e^{-y^2}dy =$$

$$= \left(\frac{\hbar k_0}{m}t\right)^2 + a^3 f^2 A^2\int\limits_{0}^{+\infty} e^{-y^2}dy = \left(\frac{\hbar k_0}{m}t\right)^2 + \frac{a^2 f^2}{2} = \left(\frac{\hbar k_0 t}{m}\right)^2 + \frac{a^2}{2} + \frac{1}{2}\left(\frac{\hbar t}{ma}\right)^2. \tag{1.16}$$

$$\langle p_x^2\rangle = \int \psi^*(p_x)^2\psi dx = \int (p_x\psi)^* p_x\psi dx = \int\left\{\hbar^2 k_0^2 + \frac{2z\hbar^3 k_0 tm}{m^2a^4+t^2\hbar^2} + \frac{z^2\hbar^2}{a^4 f^2}\right\}|\psi|^2 dz =$$

$$= \hbar^2 k_0^2 + \frac{\hbar^2}{a^4 f^2}\int z^2|\psi|^2 dz = \hbar^2 k_0^2 + \frac{\hbar^2}{2a^2}. \tag{1.17}$$

$$\langle (x-\langle x\rangle)^2\rangle = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2 = \frac{a^2}{2} + \frac{1}{2}\left(\frac{\hbar t}{ma}\right)^2. \tag{1.18}$$

$$\langle (p_x-\langle p_x\rangle)^2\rangle = \frac{\hbar^2}{2a^2}. \tag{1.19}$$

2 Задача

Найти коэффициент прохождения частицы через потенциальный барьер

$$U(x) = \begin{cases} U_0 > 0, & x\in[0,a]; \\ 0, & x\notin[0,a]. \end{cases}$$

Решение

Пусть есть свободная частица, которая налетает на потенциальный барьер. Рассмотрим уравнение Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + U_0\right)\Psi \tag{2.1}$$

Будем решать задачу для одномерного случая, то есть полагаем $\triangle = \partial_x^2$. Известно, что решением уравнения Шредингера в данном случае будет являться функция $\Psi \sim e^{-i\omega t+ikx}$.

Рассмотрим области непрерывности функции $U(x)$. Введем следующие определения. Назовем областью 1 множество $(-\infty,0)$, на нем функция $U(x)$ равна тождественному нулю, областью 2 множество $[0,a]$, на нем функция $U(x)=U_0$, и областью 3 множество $(a,+\infty)$, на нем $U(x)=0$. Будем считать, что частица летит из $-\infty$ в сторону $+\infty$. Тогда вопрос задачи можно переформулировать следующим образом: какова вероятность попадания частицы из области 1 в область 3? В каждой из введенных областей будем искать решение $\Psi_i, i=1,2,3$ уравнения (2.1), а решение

Ψ на всей числовой прямой получим путем сшивки соответствующих решений в точках разрыва потенциала.

Сначала рассмотрим случай, когда энергия частицы больше U_0. В областях 1 и 3 частица свободна, следовательно, имеем $E = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}$, из этого $k_0 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}$. В области 2 частица несвободна. Ясно, что при встрече с барьером энергия частицы не изменится, поэтому из условия $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U_0$ для области 2 имеем $k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E - U_0)}$.

Решаем методом неопределенных коэффициентов. Неопределенные коэффициенты найдем из условия сшивки. В области 1 ищем решение в виде $\Psi_1 = e^{-i\omega t + ik_0 x} + Ae^{-i\omega t - ik_0 x}$. В области 2 решение ищем в виде $\Psi_2 = Be^{-i\omega t + ikx} + Ce^{-i\omega t - ikx}$. В области 3 решение ищем в виде $\Psi_3 = De^{-i\omega t + ik_0 x}$. Здесь слагаемые с членом e^{ikx} соответствуют волне, распространяющейся в исходном направлении, а слагаемые с членом e^{-ikx} — в противоположном. Таким образом, $|A|^2$ — это коэффициент отражения от барьера, а $|D|^2$ — коэффициент прохождения через барьер.

Запишем условия сшивки. Они представляют собой условия равенства соответствующих функций и их производных в точках разрыва $x = 0$ и $x = a$.

$$
\begin{aligned}
\Psi_1|_{x=0} &= \Psi_2|_{x=0}\\
\Psi_1'|_{x=0} &= \Psi_2'|_{x=0}\\
\Psi_2|_{x=a} &= \Psi_3|_{x=a}\\
\Psi_2'|_{x=a} &= \Psi_3'|_{x=a}
\end{aligned}
$$

Распишем эти условия. Получим систему из четырех линейных уравнений на 4 неизвестные A, B, C, D. Ниже приведены уравнения, поделенные на $e^{-i\omega t}$.

$$
\begin{cases}
1 + A = B + C,\\
ik_0 - ik_0 A = ikB - ikC,\\
Be^{ika} + Ce^{-ika} = De^{ik_0 a},\\
iBke^{ika} - iCke^{-ika} = iDk_0 e^{ik_0 a}
\end{cases}
$$

Решим систему методом Крамера. Напомним, что с использованием данного метода i-ая переменная равна $\frac{\triangle_i}{\triangle}$, где $\triangle$ — определитель матрицы системы уравнений, а $\triangle_i$ равен определителю той же матрицы с замененным i-тым столбцом на столбец правой части системы.

Перепишем полученную систему в матричном виде.

$$
\begin{pmatrix}
1 & -1 & -1 & 0\\
k_0 & k & -k & 0\\
0 & e^{-ika} & e^{ika} & -e^{-ik_0 a}\\
0 & -ke^{-ika} & ke^{ika} & k_0 e^{-ik_0 a}
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix} A\\ B\\ C\\ D \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} -1\\ k_0\\ 0\\ 0 \end{pmatrix}
$$

Вычислим определитель $\triangle$ полученной матрицы. Для этого вычтем из второй строки первую, умноженную на k_0 , а к четвертой строке прибавим третью, умноженную на k_0. Получим

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & k+k_0 & -k+k_0 & 0 \\ 0 & e^{-ka} & e^{ika} & -e^{-ik_0a} \\ 0 & (k_0-k)e^{-ika} & (k_0+k)e^{ika} & 0 \end{pmatrix}$$

Таким образом, $\triangle = e^{-ik_0a}((k_0+k)^2e^{ika} - (k-k_0)^2e^{-ika})$ Теперь посчитаем $\triangle_1$ и $\triangle_4$ (напомним, что нас интересуют только переменные A и D). Итак, необходимо вычислить

$$\triangle_1 = \begin{vmatrix} -1 & -1 & -1 & 0 \\ k_0 & k & k & 0 \\ 0 & e^{-ika} & e^{ika} & -e^{-ik_0a} \\ 0 & -ke^{-ika} & ke^{ika} & k_0e^{-ik_0a} \end{vmatrix}$$

Прибавим ко второй строке первую, умноженную на k_0, а к четвертой строке третью, умноженную на k_0, получим

$$\begin{vmatrix} -1 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & k-k_0 & -k-k_0 & 0 \\ 0 & e^{-ika} & e^{ika} & -e^{-ik_0a} \\ 0 & (k_0-k)e^{-ika} & (k_0+k)e^{ika} & 0 \end{vmatrix} = -e^{-ik_0a}((k^2-k_0^2)e^{ika} - (k^2-k_0^2)e^{-ika})$$

Аналогично найдем

$$\triangle_4 = \begin{vmatrix} 1 & -1 & -1 & -1 \\ k_0 & k & -k & k_0 \\ 0 & e^{-ika} & e^{ika} & 0 \\ 0 & -ke^{-ika} & ke^{ika} & 0 \end{vmatrix} = 2k_0(k+k) = 4kk_0$$

Найдем интересующие нас переменные A и D.

$$A = \frac{\triangle_1}{\triangle} = \frac{-e^{-ik_0a}((k^2-k_0^2)(e^{ika}-e^{-ka}))}{e^{-ik_0a}((k+k_0)^2e^{ika}-(k-k_0)^2e^{-ika})} = \frac{(k^2-k_0^2)2i\sin ka}{(k-k_0)^2e^{-ika}-(k+k_0)^2e^{ika}} =$$

$$\frac{2i\sin ka}{\alpha e^{-ika} - \alpha^{-1}e^{ika}}$$

$$D = \frac{\triangle_4}{\triangle} = \frac{4kk_0}{e^{-ik_0a}((k_0+k)^2e^{ika}-(k_0-k)^2e^{-ika})} = \frac{\alpha-\alpha^{-1}}{e^{-ik_0a}(\alpha e^{-ika}-\alpha^{-1}e^{ika})}$$

Здесь $\alpha = \dfrac{k-k_0}{k+k_0}$. Найдем $|A|^2$ и $|D|^2$.

$$|\alpha e^{-ika} - \alpha^{-1}e^{ika}|^2 = |\alpha\cos ka - i\alpha\sin ka - \alpha^{-1}\cos ka - i\alpha^{-1}\sin ka|^2 =$$

$$\cos^2 ka(\alpha^2+\alpha^{-2}-2) + \sin^2 ka(\alpha^2+\alpha^{-2}+2) = \alpha^2+\alpha^{-2}-2\cos 2ka$$

Тогда

$$|A|^2 = \frac{4\sin^2 ka}{\alpha^2 + \alpha^{-2} - 2\cos 2ka}$$

$$|D|^2 = \frac{\alpha^2 + \alpha^{-2} - 2}{\alpha^2 + \alpha^{-2} - 2\cos 2ka}$$

Нетрудно проверить, что $|A|^2 + |D|^2 = 1$. Таким образом, сумма вероятностей отражения частицы от барьера и прохождения её через барьер равна 1. Распишем $|D|^2$ через k и k_0.

$$\alpha^2 + \alpha^{-2} - 2 = \frac{(k-k_0)^2}{(k+k_0)^2} + \frac{(k+k_0)^2}{(k-k_0)^2} - 2 = \frac{((k+k_0)^2 - (k-k_0)^2)^2}{(k^2-k_0^2)^2} = \frac{16k^2k_0^2}{(k^2-k_0^2)^2}$$

$$\alpha^2 + \alpha^{-2} - 2\cos 2ka = \frac{(k-k_0)^2}{(k+k_0)^2} + \frac{(k+k_0)^2}{(k-k_0)^2} - 2 + 4\sin^2 ka =$$

$$\frac{16k^2k_0^2 + 4\sin^2 ka(k^2-k_0^2)^2}{(k^2-k_0^2)^2}$$

Следовательно, получим

$$|D|^2 = \frac{4k^2k_0^2}{4k^2k_0^2 + (k^2-k_0^2)^2\sin^2 ka}$$

Для случая $E - U_0 < 0$, т. е. когда энергия частицы меньше энергии барьера, аналогичными рассуждениями получим

$$|D|^2 = \frac{4\varkappa^2k_0^2}{4\varkappa^2k_0^2 + (\varkappa^2+k_0^2)^2\operatorname{sh}^2 \varkappa a},$$

где $\varkappa = \dfrac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}$.

3 Задача

Найти уровни энергии частицы в потенциальной яме

$$U(x) = \begin{cases} -U_0 < 0, & x \in [0,a]; \\ 0, & x \notin [0,a]. \end{cases}$$

Решение

Рассмотрим случай, когда энергия частицы $E < 0$. Решать эту задачу будем аналогичным методом, что и задачу 2. Разделим числовую прямую на области, в каждой из областей будем искать решение в определенном виде, а общее решение найдем путем сшивки в точках разрыва.

Итак, областью 1 назовем множество точек $x \in (-\infty, 0)$, областью 2 множество точек $x \in [0,a]$, а областью 3 — множество $x \in (a, +\infty)$. В областях 1 и 3 имеем $k_0 = \dfrac{i}{\hbar}\sqrt{2m|E|} = i\varkappa$, в области 2 имеем $k = \dfrac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E+U_0)}$.

Общий вид решения в области 1 есть $\Psi_1(x) = Ae^{\varkappa x} + A'e^{-\varkappa x}$. Устремим $x \to -\infty$, получим $\Psi_1(x) \to \infty$ за счет члена $A'e^{-\varkappa x}$, но $\Psi_1(x)$ должна быть 0 на бесконечности, следовательно, $A' = 0$

и в области 1 мы должны искать решение в виде $\Psi_1(x) = Ae^{\varkappa x}$. Аналогичными рассуждениями получаем, что в области 3 мы должны искать решение в виде $\Psi_3(x) = De^{-\varkappa x}$. В области 2 решение ищем в виде $\Psi_2(x) = Be^{ikx} + Ce^{-ikx}$.

Условия сшивки такие же, как и в задаче 2.

$$\begin{aligned}
\Psi_1|_{x=0} &= \Psi_2|_{x=0} \\
\Psi_1'|_{x=0} &= \Psi_2'|_{x=0} \\
\Psi_2|_{x=a} &= \Psi_3|_{x=a} \\
\Psi_2'|_{x=a} &= \Psi_3'|_{x=a}
\end{aligned}$$

Перепишем эти условия сразу в матричном виде.

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 0 \\ \varkappa & ik & ik & 0 \\ 0 & -e^{ika} & -e^{-ika} & e^{-\varkappa a} \\ 0 & -ike^{ika} & ike^{-ika} & -\varkappa e^{-\varkappa a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Система однородна, следовательно, нетривиальное решение существует, когда определитель $\triangle$ матрицы системы равен 0. Найдем это условие на определитель системы. Вычтем из второй строки первую, умноженную на $\varkappa$, а к четвертой прибавим третью, умноженную на $\varkappa$, получим

$$\triangle = \begin{vmatrix} 1 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & -ik + \varkappa & ik + \varkappa & 0 \\ 0 & -e^{ika} & -e^{-ika} & e^{-\varkappa a} \\ 0 & (-\varkappa - ik)e^{ika} & (ik - \varkappa)e^{-ika} & 0 \end{vmatrix} =$$

$$-e^{-\varkappa a}(-(ik - \varkappa)^2 e^{-ika} + (ik + \varkappa)^2 e^{ika}) = 0$$

Перепишем это равенство в следующем виде

$$\frac{(ik + \varkappa)^2}{(ik - \varkappa)^2} = e^{-2ika}$$

Далее

$$\frac{k - i\varkappa}{k + i\varkappa} = \pm e^{-ika} \equiv \pm(\cos ka - i \sin ka)$$

это равенство будет выполняться, когда будут равны действительная и мнимая части справа и слева от знака равенства, то есть

$$\begin{cases} \dfrac{k^2 - \varkappa^2}{k^2 + \varkappa^2} = \pm \cos ka, \\ \dfrac{2k\varkappa}{k^2 + \varkappa^2} = \pm \sin ka \end{cases} \tag{3.1}$$

Заметим, что левая часть второго уравнения всегда положительна. Из этого получим условия на выбор знака в правой части, то есть "+" берем, когда $ka \in [2\pi n, \pi + 2\pi n]$, а "−" берем, когда $ka \in [\pi(2n - 1), 2\pi n]$, n — целое.

Сначала рассмотрим случай очень глубокой ямы, то есть $U_0 \to \infty$, следовательно $k \to \infty$. Тогда из первого уравнения системы (3.1) имеем

$$\cos ka = \pm \left.\frac{k^2 - \varkappa^2}{k^2 + \varkappa^2}\right|_{k\to\infty} = \pm \left.\frac{1 - \dfrac{\varkappa^2}{k^2}}{1 + \dfrac{\varkappa^2}{k^2}}\right|_{k\to\infty} = \pm 1.$$

Отсюда заключаем, что $ka = \pi n$, n — целое. Далее

$$\frac{2m}{\hbar^2}(E + U_0) = \frac{\pi^2 n^2}{a^2},$$

$$E + U_0 = \frac{(\pi n \hbar)^2}{2ma^2}$$

В последнем равенстве $n \neq 0$. Действительно, пусть $n = 0$. Тогда $k = 0$ и условие $ka \to \infty$ не выполняется. Волновая функция частицы в области 2 равна $B + C$. Теперь подставим $k = 0$ в исходную систему линейных уравнений. Получим, что $B + C = 0$, следовательно, волновая функция частицы в яме равна нулю, то есть частицы там нет.

Теперь рассмотрим случай, когда яма имеет конечную глубину. Имеем

$$k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - |E|)}$$

$$\varkappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m|E|}$$

Обозначим $\xi = ka/2$ и рассмотрим первое уравнение системы (3.1).

$$\frac{k^2 - \varkappa^2}{k^2 + \varkappa^2} = \pm \cos ka \tag{3.2}$$

Преобразуем левую часть (3.2)

$$\frac{k^2 - \varkappa^2}{k^2 + \varkappa^2} = \frac{(2\xi/a)^2 - \varkappa^2}{(2\xi/a)^2 + \varkappa^2} = \frac{\xi^2 - \varkappa^2 a^2/4}{\xi^2 + \varkappa^2 a^2/4} = \frac{2\xi^2 - \alpha^2}{\alpha^2},$$

где $\alpha^2 = \varkappa^2 a^2/4 + \xi^2$. Правая часть (3.2) равна $\pm\cos 2\xi$, итого получим

$$\frac{\xi^2}{\alpha^2} = \frac{1}{2}(1 \pm \cos 2\xi) \equiv \left\{\begin{matrix} \cos^2\xi \\ \sin^2\xi \end{matrix}\right\},$$

$$\left[\begin{array}{l} \dfrac{\xi}{\alpha} = |\cos\xi|, \\ \dfrac{\xi}{\alpha} = |\sin\xi| \end{array}\right.$$

Здесь первое уравнение соответствует знаку "+", а второе знаку "−". Ясно, что получились 2 трансцендентных уравнения, решать их будем графически. Нарисуем правые части обоих уравнений. Получим

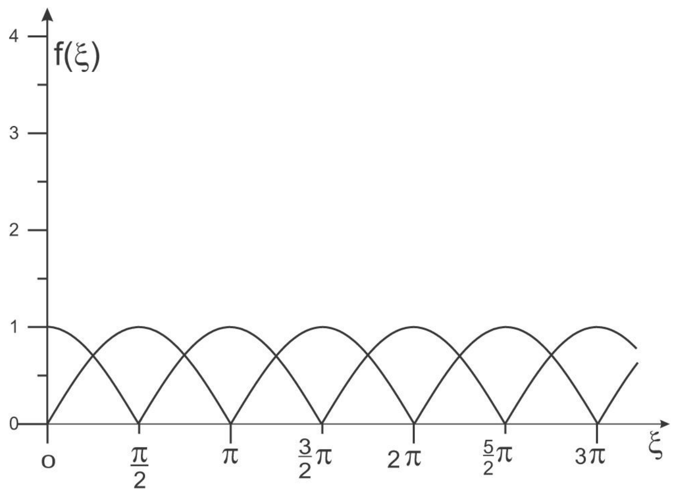

Рис. 1. Правые части уравнений

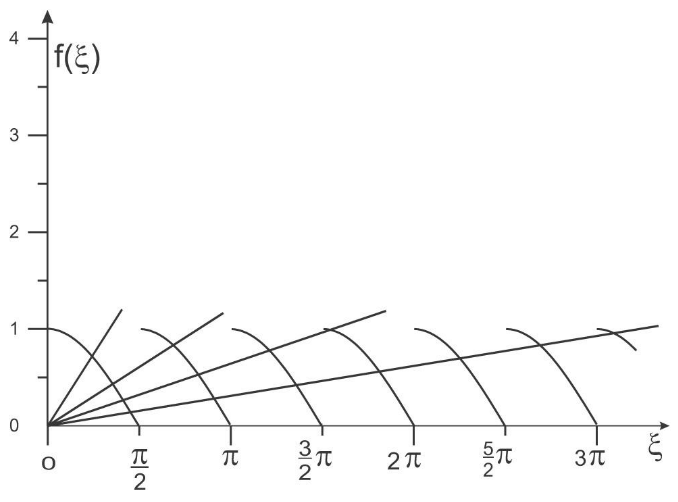

Рис. 2. Правая и левая части уравнений

С учетом условий на выбор знака, получим

Здесь нарисована также левая часть уравнений в зависимости от α. Найдем наглядный смысл параметра α и проанализируем полученное решение. Известно, что

$$\frac{\varkappa^2 a^2}{4} = \alpha^2 - \xi^2$$

Также известно, что

$$\xi = \frac{ka}{2} = \frac{a}{2\hbar}\sqrt{2m(U_0 - |E|)} = \sqrt{\frac{mU_0}{2}}\frac{a}{\hbar}\left(1 - \frac{|E|}{U_0}\right)^{1/2}$$

$$\frac{\varkappa a}{2} = \sqrt{\frac{mU_0}{2}}\frac{a}{\hbar}\left(\frac{|E|}{U_0}\right)^{1/2}$$

Из последних равенств получим, что $\alpha = \frac{a}{\hbar}\sqrt{\frac{mU_0}{2}}$, и что она практически характеризует размер ямы, так как a — ширина ямы, а U_0 — её глубина. Таким образом, из графического решения уравнения находим, что для любого сколь угодно малого размера ямы хотя бы один энергетический уровень существует, так как при $\alpha \to 0$ есть решение уравнения. С увеличением α получается больше решений уравнения, следовательно чем больше площадь ямы, тем больше в ней энергетических уровней.

4 Задача

Найти уровни энергии частицы в поле $U(x) = -g\delta(x), g > 0$.

Решение

Запишем уравнение Шредингера с соответствующим гамильтонианом

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' - g\delta(x)\psi. \tag{4.1}$$

Мы будем искать волновую функцию, удовлетворяющую уравнению Шредингера, в виде $\psi(t,x) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\psi(x)$. Тогда имеем

$$E\psi + \frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + g\delta(x)\psi = 0, \tag{4.2}$$

Проинтегрируем уравнение (4.2) в окрестности нуля.

$$\int\limits_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\left(E\psi + \frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + g\delta(x)\psi\right)dx = 0 \tag{4.3}$$

$$E\int\limits_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\psi dx + \frac{\hbar^2}{2m}\int\limits_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\psi'' dx + g\psi(0) = 0 \tag{4.4}$$

$$E\int\limits_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\psi dx + \frac{\hbar^2}{2m}(\psi'(\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon)) + g\psi(0) = 0 \tag{4.5}$$

Устремим ε к нулю. Тогда получим равенство

$$\frac{\hbar^2}{2m}(\psi'(+0) - \psi'(-0)) + g\psi(0) = 0, \tag{4.6}$$

из которого следует, что

$$\frac{\psi'(+0)}{\psi(0)} - \frac{\psi'(-0)}{\psi(0)} = -\tilde{g}, \tag{4.7}$$

где $\tilde{g} = 2mg/\hbar^2$. Таким образом, мы нашли скачок логарифмической производной волновой функции в нуле.

Волновая функция слева от нуля имеет вид $Ae^{\varkappa x}$, справа – $De^{-\varkappa x}$. Из непрерывности функции $\psi(x)$ в нуле следует, что $A = D$. Используя условие сшивки (4.7) получим следующее равенство

$$\varkappa = \frac{\tilde{g}}{2} = \frac{mg}{\hbar^2} = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}, \tag{4.8}$$

или

$$E = -\frac{mg^2}{2\hbar^2}. \tag{4.9}$$

Отсюда следует, что в δ-образной яме существует только один уровень энергии.

5 Задача

Найти уровни энергии частицы в поле $U(x) = -g[\delta(x+a) + \delta(x-a)], g > 0$.

Решение

Запишем уравнение Шредингера с соответствующим гамильтонианом

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' - g[\delta(x+a) + \delta(x-a)]\psi \tag{5.1}$$

$$E\psi + \frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + g[\delta(x+a) + \delta(x-a)]\psi(x) = 0 \tag{5.2}$$

Проделывая выкладки аналогичные выкладкам в задаче (4) получаем следующие условия сшивки

$$\frac{\hbar^2}{2m}[\psi'(-a+0) - \psi'(-a-0)] + g\psi(-a) = 0, \tag{5.3}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}[\psi'(a+0) - \psi'(a-0)] + g\psi(a) = 0, \tag{5.4}$$

или

$$\frac{\psi'(-a+0)}{\psi(-a)} - \frac{\psi'(-a-0)}{\psi(-a)} = -\tilde{g}, \tag{5.5}$$

$$\frac{\psi'(a+0)}{\psi(a)} - \frac{\psi'(a-0)}{\psi(a)} = -\tilde{g}, \tag{5.6}$$

где $\tilde{g} = 2mg/\hbar^2$.

Волновая функция ψ при $x < -a$ имеет вид Ae^{kx}, при $-a < x < a : Be^{kx}+Ce^{-kx}$, при $x > a : De^{-kx}$. Подставляя в условие сшивки получаем следующую систему (учитывая непрерывность функции $\psi(x)$)

$$\begin{cases} \dfrac{k(Be^{-kx} - Ce^{kx})}{Be^{-ka} + Ce^{ka}} - k = -\tilde{g} \\ \\ -k - \dfrac{k(Be^{kx} - Ce^{-kx})}{Be^{ka} + Ce^{-ka}} = -\tilde{g} \end{cases} \tag{5.7}$$

Поскольку правая часть этой системы равна нулю, то нетривиальное решение она имеет только тогда, когда определитель этой системы равен нулю:

$$(\tilde{g})^2 e^{-2ka} - (\tilde{g} - 2k)^2 e^{2ka} = 0. \tag{5.8}$$

Отсюда следует, что

$$\left(\frac{2k}{\tilde{g}} - 1\right)^2 = e^{-4ka}. \tag{5.9}$$

или

$$\frac{2k}{\tilde{g}} = 1 \pm e^{-2ka}. \tag{5.10}$$

Тривиальное решение $k = 0$ не несет физического смысла. Поэтому его из рассмотрения мы исключим. Легко видеть, что уравнения (5.10) имеют либо одно, либо два положительных решения. В случае, когда a мало, можно приближенно вычислить k. Используя формулу Тейлора

$$e^{-2ka} = 1 - 2ka + 2k^2a^2 + O(a^3), \tag{5.11}$$

имеем

$$k_1 \approx \frac{\tilde{g}}{\tilde{g}a + 1}, \qquad k_2 \approx \frac{\tilde{g}a - 1}{\tilde{g}a^2}. \tag{5.12}$$

Очевидно, что при $\tilde{g} \leqslant a^{-1}$ корень k_2 уже не является положительным числом. Поэтому при $2mga/\hbar^2 \leqslant 1$ расщепления энергетического уровня нет.

6 Задача

Найти значения энергии частицы, при которых обращается в нуль коэффициент отражения от потенциальной ямы

$$U(x) = \begin{cases} -U_0 < 0, & x \in [0, a]; \\ 0, & x \notin [0, a] \end{cases}$$

Решение

Воспользуемся результатами задачи 2 с заменой U_0 на $-U_0$. Имеем

$$k_0 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar},$$

$$k = \frac{\sqrt{2m(E + U_0)}}{\hbar}$$

Вспомним равенство $1 = |A|^2 + |D|^2$, где A — коэффициент отражения, а D — коэффициент прохождения частицы через потенциальную яму. Надо найти условие, когда $|A| = 0$, то есть $|D| = 1$. Из задачи 2 знаем, что

$$|D|^2 = \frac{4k^2k_0^2}{4k^2k_0^2 + (k^2 - k_0^2)^2 \sin^2 ka}$$

и $|D| = 1$ тогда и только тогда, когда $\sin ka = 0$.

$$\sin ka = 0 \Rightarrow ka = \pi n$$

и, следовательно, находим условие, соответствующее требованиям задачи

$$\frac{2m(E + U_0)}{\hbar^2} = \frac{(\pi n)^2}{a^2}.$$

Отсюда приходим к ответу

$$E = \frac{(\pi n\hbar)^2}{2ma^2} - U_0 > 0.$$

7 Задача не из списка

Решение Рассмотрим одномерный гармонический осциллятор, совершающий колебания вдоль оси x, под действием силы $F = -kx$. Потенциальная энергия такого осциллятора принимает вид: $U = \frac{kx^2}{2} = \frac{m\omega^2x^2}{2}$, где $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ — частота гармонического осциллятора.

В квантовой механике для решения данной задачи необходимо решить уравнение Шредингера для потенциальной энергии U.

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \tag{7.1}$$

$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x{}^2 + U(x,t)$— оператор полной энергии частицы (оператор Гамильтона).

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x{}^2 + \frac{\omega^2\, x^2\, m^2}{2}\right)\Psi \tag{7.2}$$

Заметим, что рассматриваемая система стационарна, то есть потенциальная энергия U не зависит от времени. В таком случае, оператор $\hat{H}$ также не зависит от времени, следовательно, решение уравнения Шредингера следует искать в виде произведения двух функций $\Psi = \psi(x)\phi(t)$. Подставляем функцию Ψ в уравнение Шредингера и, разделив затем обе части уравнения на $\psi(x)\phi(t)$, получаем

$$\frac{i\hbar}{\phi}\frac{\partial\phi}{\partial t} = \frac{1}{\psi}\hat{H}\psi$$

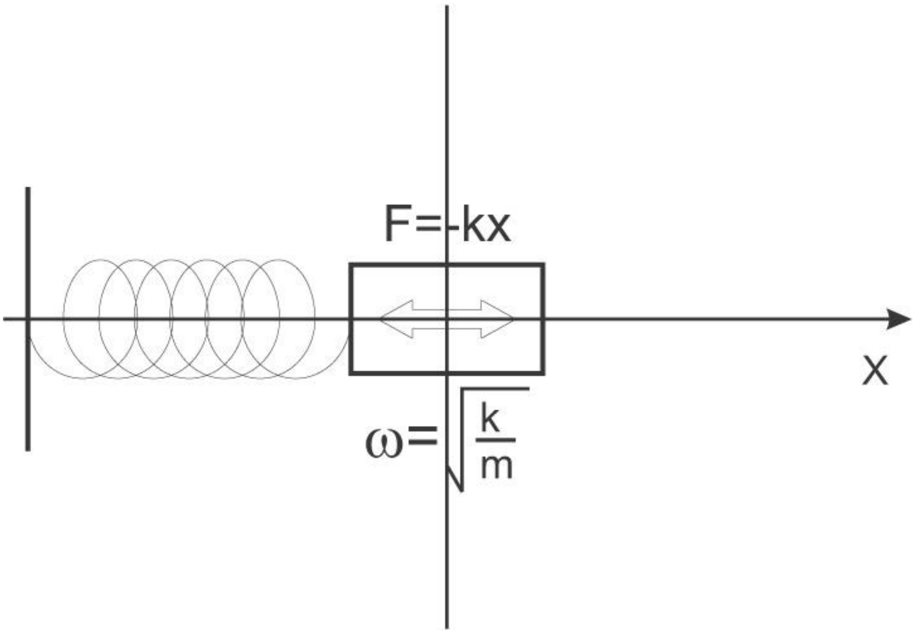

Рис. 3. Гармонический осциллятор.

Полученное равенство может выполняться лишь в случае, если левая и правая части равны постоянной величине, обозначим её E. Таким образом, имеем два уравнения:

$$E\phi = i\hbar\frac{\partial\phi}{\partial t}, \tag{7.3}$$

$$E\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x{}^2 + \frac{m\,\omega^2\,x^2}{2}\right)\psi. \tag{7.4}$$

Этот результат показывает, что ψ является собственной функцией гамильтониана $\hat{H}$ системы, а E — соответствующим собственным значением (а, следовательно, величина E не что иное, как энергия системы). Исходя из вышеизложенного, задача сводится к решению уравнения (7.4).

При этом решением уравнения (7.3) является функция $\phi = \phi_0 e^{-Ei\frac{t}{\hbar}}$, где ϕ_0 константа. Учитывая то, что как ϕ, так и ψ определены с точностью до константы, то ϕ_0 можно принять равной единице.

Для решения задачи нахождения спектра оператора $\hat{H}$ произведем замену переменных, которая преобразует $\hat{H}$ к такому виду, что коэффициенты при $\partial_x{}^2$ и x^2 равны. В таком случае на полученный коэффициент можно поделить обе части равенства и таким образом включить его в собственное значение оператора $\hat{H}$. В силу того, что собственная функция по смыслу представляет собой состояние системы, должно выполняться соотношение нормировки $||\psi|| = 1$.

Введем $\xi = \alpha\,x$:

$$E\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2\partial_\xi{}^2 + \frac{m\omega^2}{2\alpha^2}\xi^2\right)\psi.$$

Берем α такое, что $\frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 = \frac{m\omega^2}{2\alpha^2}$. В таком случае $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$. Далее подставим полученное α и приведем $\hat{H}$ к более удобному виду.

$$E\psi = \frac{\hbar\omega}{2}(-\partial_\xi{}^2 + \xi^2)\psi = \hbar\omega\frac{1}{2}\left((\xi - \partial_\xi)(\xi + \partial_\xi) + \partial_\xi\xi - \xi\partial_\xi\right)\psi$$

Заметим, что $\partial_\xi\xi = \xi\partial_\xi + 1$. Таким образом, получаем:

$$E\psi = \hbar\omega\frac{1}{2}((\xi - \partial_\xi)(\xi + \partial_\xi) + 1)\psi$$

Определение 1. *Введем операторы* $a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi-\partial_\xi)$, $a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi+\partial_\xi)$. *Оператор* a^+ *будем называть* оператором рождения, *а оператор* a — оператором уничтожения.

С учетом вышеизложенного, гамильтониан принимает вид:

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

Таким образом, исследование спектра $\hat{H}$ сводится к исследованию спектра оператора $\hat{N} = a^+a$.

Утверждение 1. *Оператор* a^+ *является эрмитово сопряженным по отношению к оператору* a.

Доказательство.

$$\sqrt{2}(\psi_1, a\psi_2) = \int \psi_1(\xi\psi_2 + \partial_\xi\psi_2)d\xi = \int \psi_1\xi\psi_2 d\xi + \int \psi_1\partial_\xi\psi_2 d\xi = \int \psi_1\xi\psi_2 d\xi + \int \psi_1 d\psi_2 =$$

Интегрируем второй интеграл по частям.

$$= \int \psi_1\xi\psi_2 d\xi + (\psi_1\psi_2)\Big|_{-\infty}^{\infty} - \int \psi_2 d\psi_1 =$$

В силу того что на бесконечности функции ψ_1 и ψ_2 принимают значение нуль, то подстановка равна нулю.

$$= \int \psi_1\xi\psi_2 d\xi - \int \psi_2 d\psi_1 = \int \psi_1\xi\psi_2 - \int \psi_2\partial_\xi\psi_1 d\xi = \int \psi_2(\xi\psi_1 - \partial_\xi\psi_1)d\xi = (a^+\psi_1, \psi_2)$$

Утверждение 2. *Коммутатор операторов* a *и* a^+ *равен единице.*

Доказательство.

$$[a, a^+] = \frac{1}{2}\left\{(\xi + \partial_\xi)(\xi - \partial_\xi) - (\xi - \partial_\xi)(\xi + \partial_\xi)\right\} =$$

$$= \frac{1}{2}\left\{\xi^2 + \partial_\xi\xi - \xi\partial_\xi + \partial_\xi^2 - \xi^2 + \partial_\xi\xi - \xi\partial_\xi - \partial_\xi^2\right\} = \partial_\xi\xi - \xi\partial_\xi$$

Как уже было замечено ранее, $\partial_\xi\xi = \xi\partial_\xi + 1$, следовательно $[a, a^+] = aa^+ - a^+a = 1$.

Докажем некоторые свойства $\hat{N}$.

– Докажем, что спектр $\hat{N}$ ограничен снизу. Рассмотрим некоторую нормированную собственную функцию ψ_λ, а именно $\hat{N}\psi_\lambda = \lambda\psi_\lambda$. Будем считать, что $\|\psi_\lambda\| = 1$, тогда

$$(\psi_\lambda, \hat{N}\psi_\lambda) = \lambda(\psi_\lambda, \psi_\lambda) = \lambda.$$

С другой стороны,

$$\lambda = (\psi_\lambda, a^+ a\psi_\lambda) = ((a^+)^*\psi_\lambda, a\psi_\lambda) = (a\psi_\lambda, a\psi_\lambda) = \|a\psi_\lambda\|^2 \geqslant 0.$$

Вместе с этим получаем, что $\|a\psi_\lambda\| = \sqrt{\lambda}$.

– Докажем, что $a^+\psi_\lambda$ и $a\psi_\lambda$ также являются собственными функциями $\hat{N}$. Для этого, воспользовавшись утверждением 2, получим перестановочные формулы для $\hat{N}$ и операторов a и a^+:

$$\hat{N}a^+ = a^+aa^+ = a^+(a^+a + 1) = a^+(\hat{N} + 1)$$

$$\hat{N}a = a^+aa = (aa^+ - 1)a = a(a^+a - 1) = a(\hat{N} - 1)$$

Теперь вычислим результат действия оператора $\hat{N}$ на функции $a^+\psi_\lambda$ и $a\psi_\lambda$.

$$\hat{N}(a\psi_\lambda) = a(\hat{N} - 1)\psi_\lambda = a\hat{N}\psi_\lambda - a\psi_\lambda = (\lambda - 1)a\psi_\lambda$$

$$\hat{N}(a^+\psi_\lambda) = a^+(\hat{N} + 1)\psi_\lambda = a^+\hat{N}\psi_\lambda + a^+\psi_\lambda = (\lambda + 1)a^+\psi_\lambda$$

Следовательно, операторы a^+ и a переводят функцию ψ_λ в другие собственные функции оператора $\hat{N}$, а именно: $a\psi_\lambda = c_-\psi_{\lambda-1}$; $a^+\psi_\lambda = c_+\psi_{\lambda+1}$. Здесь $c_- = \sqrt{\lambda}$ в силу равенства $\|a\psi_\lambda\| = \sqrt{\lambda}$, а $c_+ = \sqrt{\lambda + 1}$ т. к.

$$(\lambda + 1)\psi_\lambda = (\hat{N} + 1)\psi_\lambda = aa^+\psi_\lambda = c_+a\psi_{\lambda+1} = c_+\sqrt{\lambda + 1}\psi_\lambda.$$

С учетом вышеизложенного, для любого $\lambda \neq 0$ верно то, что $\psi_{\lambda-1} \neq 0$. Таким образом, у оператора $\hat{N}$ не может быть положительных нецелых собственных значений λ, иначе, применяя оператор уничтожения к собственной функции ψ_λ, можно будет прийти к противоречию с тем, что спектр $\hat{N}$ неотрицателен.

Покажем, что все неотрицательные целые числа принадлежат спектру оператора $\hat{N}$. Для этого будет достаточно привести ψ_0. По определению, ψ_0 есть такая функция, что $\hat{N}\psi_0 = 0$. Заметим, что $\hat{N} = a^+a$, следовательно, достаточно привести функцию, удовлетворяющую уравнению $a\psi_0 = 0$, то есть $\frac{1}{\sqrt{2}}(\xi + \partial_\xi)\psi_0 = 0$. Решением является функция $\psi_0 = C_0 e^{-\xi^2/2}$. Константу найдем из условия $\|\psi_0\| = 1$.

$$\|\psi_0\| = {C_0}^2 \int e^{-\xi^2} dx = 1 \quad \text{Вспомним, что } \xi = \alpha x.$$

$${C_0}^2 \frac{1}{\alpha} \int e^{-\xi^2} d\xi = 1, \qquad {C_0}^2 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}, \qquad \psi_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\xi^2/2}. \tag{7.5}$$

$$a^+\psi_0 = \psi_1, \qquad (a^+)^2\psi_0 = \psi_2\sqrt{2}, \qquad (a^+)^n\psi_0 = \psi_n\sqrt{n!}. \tag{7.6}$$

Также можно записать явный вид собственных функций оператора $\hat{N}$:

$$\psi_n = \frac{(a^+)^n\psi_0}{\sqrt{n!}} = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}(a^+)^n e^{-\xi^2/2}$$

Таким образом, мы нашли собственные функции оператора $\hat{H}$. Соответствующие собственные значения $\hat{H}$ выражаются через собственные значения $\hat{N}$ и могут быть представлены в виде: $\hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$, где n — положительное целое число, при этом данное собственное значение соответствует уже вычисленной собственной функции ψ_n.

Итак, была получена формула, выражающая собственные функции ψ_n. Заметим, что данная формула не совсем удобна для вычисления собственных функций в силу наличия в записи оператора a^+, возведенного в n-ю степень. Оператор рождения можно убрать из формулы, проведя некоторые преобразования.

Утверждение 3.

$$(\xi - \partial_\xi) = -e^{\xi^2/2}\partial_\xi e^{-\xi^2/2}$$

Доказательство.

$$e^{\xi^2/2}\partial_\xi e^{-\xi^2/2} = e^{\xi^2/2}(-\xi e^{-\xi^2/2} + e^{-\xi^2/2}\partial_\xi) = -\xi + \partial_\xi$$

В соответствии с вышеизложенным, $(a^+)^n$ *представляется в виде*

$$\frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n}}e^{\xi^2/2}\partial_\xi{}^n e^{-\xi^2/2}.$$

Таким образом, ψ_n *можно привести к виду:*

$$\begin{aligned}\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}(-1)^n e^{\xi^2/2}\partial_\xi{}^n e^{-\xi^2/2}e^{-\xi^2/2} = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}(-1)^n e^{\xi^2/2}\partial_\xi{}^n e^{-\xi^2} = \\ = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\xi^2/2}(-1)^n e^{\xi^2}\partial_\xi{}^n e^{-\xi^2}.\end{aligned} \tag{7.7}$$

Отметим, что после раскрытия дифференциалов выражение $(-1)^n e^{\xi^2}\partial_\xi^n e^{-\xi^2}$ примет вид многочлена, такие многочлены называются многочленами Эрмита, обозначим, как H_n. Таким образом собственные функции оператора $\hat{H}$ можно выразить, как

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\xi^2/2}H_n(\xi). \tag{7.8}$$

Касательно исходной задачи — нахождению решений уравнения Шредингера, то в самом начале было показано, что $\Psi = \psi(x)\phi(t)$, следовательно Ψ_n, соответствующая уровню энергии $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$, равна $\psi_n e^{-iEt/\hbar}$.

8 Задача

Вычислить матричный элемент для гармонического осциллятора $(\psi_0, \hat{x}^{2005}\psi_{2005})$.

Решение

Вычислим некоторые матричные элементы, имеющие явный физический смысл. Основная задача будет решена чуть позже, по аналогии с приведенными ниже рассуждениями.

Найдем средние значения x и p_x — $(\psi_n, x\psi_n)$ и $(\psi_n, p\psi_n)$. Заметим, что $a+a^+ = \sqrt{2}\xi = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}x$, следовательно, $x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a+a^+)$. Таким образом, получаем, что

$$(\psi_n, x\psi_n) = (\psi_n, (a+a^+)\psi_n)\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}.$$

Заметим, что $a\psi_n \sim \psi_{n-1}$, а $a^+\psi_n \sim \psi_{n+1}$. Учитывая, что ψ_n есть собственные функции самосопряженного оператора, то для разных n эти функции ортогональны. Следовательно

$$(\psi_n, x\psi_n) = 0.$$

А с учетом того, что $p_x = -i\hbar\partial_x$, получаем:

$$a - a^+ = \sqrt{2}\partial_\xi = -\frac{\sqrt{2}}{i\hbar}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}p_x = i\sqrt{\frac{2}{m\omega\hbar}}p_x.$$

$$(\psi_n, p_x\psi_n) = (\psi_n, -i\sqrt{\frac{\hbar\omega m}{2}}(a-a^+)\psi_n) = 0$$

Вычислим дисперсии для x и p_x. Так как средние значения координаты и импульса равны нулю, то они равны $(\psi_n, x^2\psi_n)$ и $(\psi_n, p_x^2\psi_n)$.

$$(\psi_n, x^2\psi_n) = (\psi_n, (a+a^+)^2\psi_n)\frac{\hbar}{2m\omega} = (\psi_n, (a^2 + aa^+ + a^+a + a^{+2})\psi_n)\frac{\hbar}{2m\omega}.$$

Слагаемые с a^2 и a^{+2} можно отбросить, так как при действии их на ψ_n, получим функции пропорциональные ψ_{n-2} и ψ_{n+2} соответственно, а эти функции ортогональны ψ_n.

Вычислим оставшиеся слагаемые:

$$aa^+\psi_n = a\sqrt{n+1}\psi_{n+1} = \sqrt{(n+1)(n+1)}\psi_n = (n+1)\psi_n.$$

$$a^+a\psi_n = a\sqrt{n}\psi_{n-1} = \sqrt{nn}\psi_n = n\psi_n.$$

В результате получаем:

$$(\psi_n, x^2\psi_n) = (\psi_n, (2n+1)\psi_n)\frac{\hbar}{2m\omega} = (2n+1)\frac{\hbar}{2m\omega}.$$

Проведя аналогичные вычисления для $\hat{p}$ можно прийти к следующему результату:

$$(\psi_n, p_x^2\psi_n) = (\psi_n, -(a - a^+)^2\psi_n)\frac{\hbar m\omega}{2} = (2n+1)\frac{\hbar m\omega}{2}.$$

А теперь можно получить замечательный результат, касающийся кинетической и потенциальной энергии системы. Как известно, $E_{\text{КИН}} = \dfrac{p^2}{2m}$, а $E_{\text{ПОТЕНЦ}} = \dfrac{kx^2}{2}$. В поставленных условиях, $E_{\text{КИН}} = \frac{m\omega^2x^2}{2}$. Подставим среднее значение $x^2 = (2n+1)\frac{\hbar}{2m\omega}$, получаем $E_{\text{КИН}} = \frac{(2n+1)\hbar\omega}{4}$. Заметим, что $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$. В выражение потенциальной энергии подставляем $k = m\omega^2$, — $E_{\text{ПОТ}} = \frac{(2n+1)\hbar\omega}{4}$

Вернемся к первоначальной задаче.

Проведем преобразования, аналогичные тем, что мы делали при вычислении среднего x и его дисперсии.

$$(\psi_0, x^{2005}\psi_{2005}) = (\psi_0, (a + a^+)^{2005}\psi_{2005})\left(\frac{h}{2m\omega}\right)^{2005/2} =$$

Заметим, что после раскрытии 2005 степени можно будет выкинуть все слагаемые, кроме a^{2005}. Так как в остальных слагаемых суммарная степень при a меньше 2005, и, следовательно, при действии на ψ_{2005} получим $C\psi_i$, где C — какая-то константа, а $i > 0$, а следовательно, $(\psi_0, \psi_i) = 0$.

$$= (\psi_0, a^{+2005}\psi_{2005})\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{2005/2} = \sqrt{2005!}\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{2005/2}$$

9 Задача не из списка

Найти уровни энергии гармонического осциллятора в поле силы тяжести.

Рассмотрим одномерный гармонический осциллятор, совершающий колебания вдоль оси x, под действием возвращающей силы $F = -kx$ и силы тяжести $F_{\text{Т}} = mg$. Потенциальная энергия такого осциллятора принимает вид: $U = \frac{kx^2}{2} - mgx = \frac{m\omega^2x^2}{2} - mgx$, где $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ — собственная частота гармонического осциллятора.

Решение

Аналогично задаче о гармоническом осцилляторе, будем искать собственные значения гамильтониана $\hat{H}$. Запишем уравнение Шредингера для потенциальной энергии U.

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi$$

$\hat{H} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\partial_x{}^2 + U(x,t)$— оператор полной энергии частицы (оператор Гамильтона).

С учетом стационарности U, функцию Ψ можно представить, как $\Psi = \psi(x)e^{-Ei\frac{t}{\hbar}}$ и перейти к решению уравнения

$$E\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x{}^2 + U\right)\psi$$

$$U = \frac{kx^2}{2} - mgx = \frac{m\omega^2x^2}{2} - mgx \qquad (9.1)$$

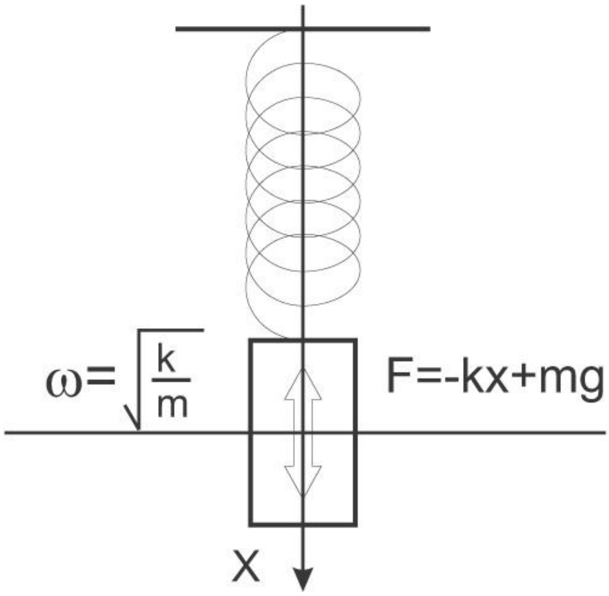

Рис. 4. Гармонический осциллятор в поле силы тяжести.

Приведем запись U к более простому виду. Выделим полный квадрат, делая замену переменной:

$$U = \frac{m\omega^2}{2}(x - x_0)^2 - \frac{m\omega^2}{2}{x_0}^2 \text{ , где } x_0 = g/\omega^2.$$

Введем $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ и $\xi_0 = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x_0$. Обозначим $\tilde{\xi} = \xi - \xi_0$. Выразим оператор Гамильтона системы.

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\left(-\partial_{\tilde{\xi}}^2 + \tilde{\xi}^2 - \frac{m\omega^2}{2}{x_0}^2\frac{2}{\hbar\omega}\right) =$$

$$= \frac{\hbar\omega}{2}\left((\tilde{\xi} - \partial_{\tilde{\xi}})(\tilde{\xi} + \partial_{\tilde{\xi}}) - \tilde{\xi}\partial_{\tilde{\xi}} + \partial_{\tilde{\xi}}\tilde{\xi} - \xi_0^2\right) = \hbar\omega\left(a^+a + \frac{1}{2}(1 - {\xi_0}^2)\right)$$

Аналогично задаче нахождения уровней энергии гармонического осциллятора, здесь необходимо вычислить собственные значения $\hat{H}$ и соответствующие им собственные функции $\tilde{\psi}_n$. Учитывая, что спектр и собственные функции оператора a^+a известны, то

$$\tilde{E}_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}(1 - {\xi_0}^2)\right) = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\left(1 - \frac{mg^2}{\hbar\omega^3}\right)\right) = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{mg^2}{2\omega^2}.$$

$$\tilde{\psi}_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\tilde{\xi}^2/2}H_n(\tilde{\xi}),$$

Предположим, что в момент времени $t = 0$ система находится в основном состоянии, тогда этому состоянию соответствует волновая функция ψ_0 (взятая из задачи о гармоническом осцилляторе). Если «отпустить систему» и позволить ей продолжить движение, то волновая функция системы будет представлять собой сумму следующего ряда:

$$\tilde{\Psi}(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n\tilde{\psi}_n(x)e^{-i\tilde{E}_n t/\hbar}. \quad (9.2)$$

При этом $|a_n|^2 = |(\psi_0, \tilde{\psi}_n)|^2$ — представляют собой вероятности стационарной системы оказаться в определенном состоянии $\tilde{\psi}_n$. Очевидно, что $\sum_{n=0}^{\infty} |a_n|^2 = 1$.

Найдем матричный элемент a_n.

$$a_n = (\psi_0, \tilde{\psi}_n) = \int dx \psi_0(\xi) \tilde{\psi}_n(\xi - \xi_0) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{\pi 2^n n!}} \int d\xi e^{-\xi^2/2} e^{(\xi-\xi_0)^2/2} \partial_\xi{}^n e^{-(\xi-\xi_0)^2} =$$

$$= \frac{(-1)^n}{\sqrt{\pi 2^n n!}} \int d\xi e^{-\xi\xi_0 + \xi_0^2/2} \partial_\xi{}^n e^{-(\xi-\xi_0)^2}.$$

Интегрируем по частям n раз. В итоге получаем, что

$$a_n = e^{-\xi_0^2/4} \left(-\frac{\xi_0}{\sqrt{2}}\right)^n \frac{1}{\sqrt{n!}}.$$

Полученная формула представляет собой распределение Пуассона.

Далее будет показано, что исходная система обладает тем свойством, что средние значения операторов x и p_x ведут себя с течением времени так же, как и в классическом случае.

Запишем некоторые полученные ранее факты, которые понадобятся при вычислениях:

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \text{ и } \xi_0 = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_0;$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi - \xi_0 + \partial\xi) \text{ и } a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi - \xi_0 - \partial\xi).$$

В силу разложения (9.2) верно следующее равенство:

$$a\tilde{\psi} = e^{-i\omega t} \left(-\frac{\xi_0}{\sqrt{2}}\right) \tilde{\psi}$$

Состояния, описываемые собственными функциями оператора уничтожения, называются когерентными.

Теперь перейдем непосредственно к вычислению средних $\langle x \rangle$ и $\langle p_x \rangle$.

$$\langle x - x_0 \rangle = (\tilde{\psi}, (x - x_0)\tilde{\psi}) = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} (\tilde{\psi}, (\xi - \xi_0)\tilde{\psi}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\tilde{\psi}, (a^+ + a)\tilde{\psi})$$

$$\langle x - x_0 \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \left\{ (\tilde{\psi}, a\tilde{\psi}) + (a\tilde{\psi}, \tilde{\psi}) \right\} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \left(-\frac{\xi_0}{\sqrt{2}}\right)$$

$$\langle x - x_0 \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (2\cos\omega t) \left(-\frac{\xi_0}{\sqrt{2}}\right) = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} (\cos\omega t)(-\xi_0) = -x_0 \cos\omega t$$

Следовательно,

$$\langle x \rangle = x_0(1 - \cos\omega t). \tag{9.3}$$

Теперь вычислим дисперсию величины x. Более удобно выражение дисперсии будет выразить через $x - x_0$ и уже вычисленные величины:

$$\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \langle (x - x_0)^2 \rangle + 2\langle x \rangle x_0 - x_0^2 - \langle x \rangle^2.$$

Единственное неизвестное слагаемое в полученном выражении — $\langle (x - x_0)^2 \rangle$, найдем его аналогично вычислению $\langle x - x_0 \rangle$:

$$\langle (x - x_0)^2 \rangle = (\tilde{\psi}, (x - x_0)^2 \tilde{\psi}) = \frac{\hbar}{m\omega}(\tilde{\psi}, (\xi - \xi_0)\tilde{\psi}) =$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega}(\tilde{\psi}, (a^+ + a)^2 \tilde{\psi}) = \frac{\hbar}{2m\omega}(\tilde{\psi}, ((a^+)^2 + a^2 + a^+ a + a a^+)\tilde{\psi}) =$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega}(\tilde{\psi}, ((a^+)^2 + a^2 + 2a^+ a + 1)\tilde{\psi}) = \frac{\hbar}{2m\omega}(e^{2i\omega t} + e^{-2i\omega t} + 2)\left(-\frac{\xi_0}{\sqrt{2}}\right)^2 + \frac{\hbar}{2m\omega} =$$

$$= \frac{1}{2}x_0^2(1 + \cos 2\omega t).$$

Теперь преобразуем косинус двойного угла и получим:

$$\langle (x - x_0)^2 \rangle = \frac{1}{2}x_0^2(\cos 2\omega t + 1) + \frac{\hbar}{2m\omega} = \frac{1}{2}x_0^2(2\cos^2 \omega t - 1 + 1) + \frac{\hbar}{2m\omega} = x_0^2 \cos^2 \omega t + \frac{\hbar}{2m\omega}$$

Теперь запишем выражение для дисперсии:

$$\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = x_0^2 \cos^2 \omega t + \frac{\hbar}{2m\omega} + 2x_0(1 - \cos \omega t)x_0 - x_0^2 - (x_0(1 - \cos \omega t))^2 =$$

Объединяем первое, третье и четвертое слагаемые.

$$= x_0^2(1 - \cos \omega t)^2 + \frac{\hbar}{2m\omega} - x_0^2(1 - \cos \omega t)^2$$

В результате получаем:

$$\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}. \tag{9.4}$$

Аналогичные вычисления можно провести и для вычисления дисперсии импульса. Запишем сразу результат:

$$\langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle = \frac{\hbar m\omega}{2}.$$

Отметим, что $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$ и $\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$. Таким образом получаем, что для рассматриваемых состояний верно равенство

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}, \tag{9.5}$$

то есть соотношение неопределенности для когерентных состояний минимизируется.

10 Задача

Найти уровни энергии системы с гамильтонианом:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{m}{2}\omega^2(x^2 + y^2) + \gamma xy, \quad |\gamma| < m\omega^2. \tag{10.1}$$

Решение

Данная задача может быть решена при помощи замены переменных, при которой гамильтониан примет такой вид, что переменные в уравнении Шредингера разделятся. Но мы воспользуемся так называемым преобразованием Боголюбова, в результате которого возникнут новые операторы рождения и уничтожения, такие, что гамильтониан факторизуется. После замены для координаты x $a_1^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi_1 - \partial_{\xi_1}), a_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi_1 + \partial_{\xi_1})$ где $\xi_1 = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$, и аналогичной для координаты y, приведем $\hat{H}$ к виду

$$\hat{H} = \hbar\omega\{a_1^+ a_1 + a_2^+ a_2 + \frac{\beta}{2}(a_1^+ + a_1)(a_2^+ + a_2) + 1\}, \quad \text{где } \beta = \frac{\gamma}{m\omega}.$$

Действовать будем в два этапа. Сначала найдем преобразование, при котором в гамильтониане не будет слагаемых вида $a_1 a_2$.

Пусть

$$\begin{cases} b_1 = \alpha a_1 + \beta a_2 \\ b_2 = \gamma a_1 + \delta a_2 \end{cases}, \quad \text{тогда} \quad \begin{cases} b_1^+ = \alpha^* a_1^+ + \beta^* a_2^+ \\ b_2^+ = \gamma^* a_1^+ + \delta^* a_2^+ \end{cases}$$

Также необходимо потребовать выполнение условий $[b_1, b_1^+] = 1$, $[b_2, b_2^+] = 1$, $[b_1, b_2^+] = 0$ и $[b_2, b_1^+] = 0$.

$$\begin{cases} [b_1, b_1^+] = (\alpha a_1 + \beta a_2)(\alpha^* a_1^+ + \beta^* a_2^+) - (\alpha^* a_1^+ + \beta^* a_2^+)(\alpha a_1 + \beta a_2) \\ [b_2, b_2^+] = (\gamma a_1 + \delta a_2)(\gamma^* a_1^+ + \delta^* a_2^+) - (\gamma^* a_1^+ + \delta^* a_2^+)(\gamma a_1 + \delta a_2) \\ [b_1, b_2^+] = (\alpha a_1 + \beta a_2)(\gamma^* a_1^+ + \delta^* a_2^+) - (\gamma^* a_1^+ + \delta^* a_2^+)(\alpha a_1 + \beta a_2) \\ [b_2, b_1^+] = (\gamma a_1 + \delta a_2)(\alpha^* a_1^+ + \beta^* a_2^+) - (\alpha^* a_1^+ + \beta^* a_2^+)(\gamma a_1 + \delta a_2) \end{cases}$$

$$\begin{cases} [b_1, b_1^+] = \alpha\alpha^* a_1 a_1^+ + \beta\beta^* a_2 a_2^+ - \alpha\alpha^* a_1^+ a_1 - \beta\beta^* a_2^+ a_2 = \alpha\alpha^* + \beta\beta^* = 1 \\ [b_2, b_2^+] = \gamma\gamma^* a_1 a_1^+ + \delta\delta^* a_2 a_2^+ - \gamma\gamma^* a_1^+ a_1 - \delta\delta^* a_2^+ a_2 = \gamma\gamma^* + \delta\delta^* = 1 \\ [b_1, b_2^+] = \alpha\gamma^* a_1 a_1^+ + \beta\delta^* a_2 a_2^+ - \gamma^*\alpha a_1^+ a_1 - \delta^*\beta a_2^+ a_2 = \alpha\gamma^* + \beta\delta^* = 0 \\ [b_1, b_2^+] = \gamma\alpha^* a_1 a_1^+ + \delta\beta^* a_2 a_2^+ - \alpha^*\gamma a_1^+ a_1 - \beta^*\delta a_2^+ a_2 = \gamma\alpha^* + \delta\beta^* = 0 \end{cases}$$

Данную систему можно записать, как

$$\begin{pmatrix} \alpha, \beta \\ \gamma, \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha, \beta \\ \gamma, \delta \end{pmatrix}^* = E$$

Следовательно, матрица $\begin{pmatrix} \alpha, \beta \\ \gamma, \delta \end{pmatrix}$ является унитарной. Значит замену координат можно записать в виде :

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\phi), -\sin(\phi) \\ \sin(\phi), \cos(\phi) \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} b_1^+ \\ b_2^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\phi), -\sin(\phi) \\ \sin(\phi), \cos(\phi) \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} a_1^+ \\ a_2^+ \end{pmatrix}.$$

Запишем обратное преобразование:

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\phi), \sin(\phi) \\ -\sin(\phi), \cos(\phi) \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} a_1^+ \\ a_2^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\phi), \sin(\phi) \\ -\sin(\phi), \cos(\phi) \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} b_1^+ \\ b_2^+ \end{pmatrix}.$$

Подставим полученные выражения в первые два слагаемые $\hat{H}$.

$$a_1^+a_1 + a_2^+a_2 = (\cos\phi b_1^+ + \sin\phi b_2^+)(\cos\phi b_1 + \sin\phi b_2) + (-\sin\phi b_1^+ + \cos\phi b_2^+)(-\sin\phi b_1 + \cos\phi b_2) =$$

$$= \cos\phi\cos\phi b_1^+b_1 + \sin\phi\cos\phi b_2^+b_1 + \sin\phi\cos\phi b_1^+b_2 + \sin\phi\sin\phi b_2^+b_2 +$$

$$\sin\phi\sin\phi b_1^+b_1 - \cos\phi\sin\phi b_2^+b_1 - \sin\phi\cos\phi b_1^+b_2 + \cos\phi\cos\phi b_2^+b_2$$

$$= (\cos^2\phi + sin^2\phi)b_1^+b_1 + (\cos^2\phi + sin^2\phi)b_2^+b_2 = b_1^+b_1 + b_2^+b_2.$$

Теперь проведем замену переменных в третьем слагаемом $\hat{H}$

$$(a_1^+ + a_1)(a_2^+ + a_2) = (\cos\phi b_1^+ + \sin\phi b_2^+ + \cos\phi b_1 + \sin\phi b_2)(-\sin\phi b_1^+ + \cos\phi b_2^+ - \sin\phi b_1 + \cos\phi b_2) =$$

$$= (\cos\phi(b_1^+ + b_1) + \sin\phi(b_2^+ + b_2))(-\sin\phi(b_1^+ + b_1) + \cos\phi(b_2^+ + b_2)) =$$

$$= -\cos\phi\sin\phi(b_1^+ + b_1)^2 + \sin\phi\cos\phi(b_2^+ + b_2)^2 + \cos^2\phi(b_1^+ + b_1)(b_2^+ + b_2) - \sin^2\phi(b_2^+ + b_2)(b_1^+ + b_1) \quad (*)$$

Отметим, что цель замены переменных — избавиться от слагаемых, в которые входят b_1 и b_2 (b_1^+ и b_2, и т.п.). А значит, если принять $\phi = \pi/4$, то получим, что последние два слагаемых в $(*)$ можно переписать как сумму четырех коммутаторов $\frac{1}{2}([b_1^+, b_2^+] + [b_1, b_2^+] + [b_1^+, b_2] + [b_1, b_2])$, которая равна нулю. Таким образом, получаем, что замена переменных с матрицей $\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$ приводит к желаемому результату. После замены оператор $\hat{H}$ принимает следующий вид:

$$\hat{H} = \hbar\omega\{b_1^+b_1 + b_2^+b_2 + \frac{\beta}{4}(-(b_1^+ + b_1)^2 + (b_2^+ + b_2)^2) + 1\}, \quad \text{где } \beta = \tfrac{\gamma}{m\omega} \tag{10.2}$$

+Теперь произведем замену, что бы полностью избавиться от последнего слагаемого.

$$\begin{cases} d_1 = \alpha b_1^+ + \beta b_1 \\ d_2 = \gamma b_2^+ + \delta b_2 \end{cases}, \quad \text{тогда} \quad \begin{cases} d_1^+ = \alpha^* b_1 + \beta^* b_1^+ \\ d_2^+ = \gamma^* b_2 + \delta^* b_2^+ \end{cases}$$

Из условий $[d_1, d_1^+] = 1$, $[d_2, d_2^+] = 1$, $[d_1, d_2^+] = 0$ и $[d_2, d_1^+] = 0$ (аналогично предыдущей замене) получаем систему:

$$\begin{cases} [d_1, d_1^+] = \alpha\alpha^* b_1^+b_1 + \beta\beta^* b_1b_1^+ - \alpha\alpha^* b_1b_1^+ - \beta\beta^* b_1^+b_1 = \alpha\alpha^* - \beta\beta^* = 1 \\ [d_2, d_2^+] = \gamma\gamma^* b_1b_1^+ + \delta\delta^* b_2b_2^+ - \gamma\gamma^* a_1^+a_1 - \delta\delta^* a_2^+a_2 = \gamma\gamma^* - \delta\delta^* = 1 \\ [d_1, d_2^+] = \alpha\gamma^* b_1b_1^+ + \beta\delta^* b_2b_2^+ - \gamma^*\alpha a_1^+a_1 - \delta^*\beta a_2^+a_2 = \alpha\gamma^* - \beta\delta^* = 0 \\ [d_1, d_2^+] = \gamma\alpha^* b_1b_1^+ + \delta\beta^* b_2b_2^+ - \alpha^*\gamma a_1^+a_1 - \beta^*\delta a_2^+a_2 = \gamma\alpha^* - \delta\beta^* = 0 \end{cases}$$

Таким образом, матрица преобразования является матрицей гиперболического поворота и может быть записана в виде: $\begin{pmatrix} \mathrm{ch}(\phi), -\mathrm{sh}(\phi) \\ \mathrm{sh}(\phi), \quad \mathrm{ch}(\phi) \end{pmatrix}$

Аналогично предыдущей замене можно было бы подставить выражения для d в полученную формулу, затем сократить некоторые слагаемые, провести рассуждения касательно того, каким надо выбрать ϕ, но эта работа проделана не будет в силу того, что данные вычисления довольно громоздки и полностью аналогичны уже проделанным. Сразу приведем результат.

Положим ϕ таким, что $\mathrm{th}2\phi = \frac{\beta/2}{1+\beta/2}$. Тогда гамильтониан примет вид:

$$\hat{H} = \hbar\omega \left\{ \sqrt{1+\beta}\left(d_1^+ d_1 + \frac{1}{2}\right) + \sqrt{1-\beta}\left(d_2^+ d_2 + \frac{1}{2}\right)\right\}. \tag{10.3}$$

Так как операторы N_1 и N_2 коммутируют, то спектр гамильтониана представляет собой сумму спектров:

$$E_{n_1 n_2} = \hbar\omega \left\{ \sqrt{1+\beta}\left(n_1 + \frac{1}{2}\right) + \sqrt{1-\beta}\left(n_2 + \frac{1}{2}\right)\right\} \tag{10.4}$$

11 Задача не из списка

Найти собственные значения оператора J^2.

Решение

Напомним, что

$$\overrightarrow{J} = \overrightarrow{L}/\hbar = -i\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{\nabla} = \begin{vmatrix} \boldsymbol{e_x} & \boldsymbol{e_y} & \boldsymbol{e_z} \\ x & y & z \\ -i\frac{\partial}{\partial x} & -i\frac{\partial}{\partial y} & -i\frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix} \tag{11.1}$$

$$J^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2. \tag{11.2}$$

Легко проверить, что справедливы следующие коммутационные соотношения

$$[J_k, J_n] = i\varepsilon_{knm} J_m,$$

$$[J_k, J^2] = 0 \tag{11.3}$$

Введем операторы $J_+ = J_1 + iJ_2, J_- = J_1 - iJ_2$. Тогда поскольку $J_k^+ = J_k$, то $(J_\pm)^+ = J_\mp$ и

$$[J_3, J_+] = J_+,$$

$$[J_3, J_-] = -J_-. \tag{11.4}$$

Далее,

$$[J_+, J_-] = 2J_3 \tag{11.5}$$

$$[J^2, J_+] = [J^2, J_-] = [J^2, J_3] = 0. \tag{11.6}$$

$$J^2 = \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) + J_3^2. \tag{11.7}$$

$$J_-J_+ = J^2 - J_3(J_3+1)$$

$$J_+J_- = J^2 - J_3(J_3-1) \tag{11.8}$$

Из функционального анализа известно, что если операторы коммутируют, то существует общий набор собственных функций для этих операторов. Тогда можно записать задачу о нахождении собственных значений и собственных функций для операторов J^2 и J_3 следующим образом

$$J^2\psi_{\lambda m} = \lambda\psi_{\lambda m}, \qquad J_3\psi_{\lambda m} = m\psi_{\lambda m} \tag{11.9}$$

Тогда

$$\lambda(\psi_{\lambda m}, J^2\psi_{\lambda m}) = \sum_k(\psi_{\lambda m}, J_k^2\psi_{\lambda m}) = \sum_k(J_k\psi_{\lambda m}, J_k\psi_{\lambda m}) =$$

$$= \sum ||J_k\psi_{\lambda m}||^2 \geqslant 0. \tag{11.10}$$

Следовательно, $\lambda \geqslant 0$.

Далее,

$$J_+J_- = [\lambda - m(m+1)]\psi_{\lambda m},$$

$$J_-J_+ = [\lambda - m(m-1)]\psi_{\lambda m}. \tag{11.11}$$

Тогда

$$||J_+\psi_{\lambda m}||^2 = (\psi_{\lambda m}, J_-J_+\psi_{\lambda m}) = [\lambda - m(m+1)]||\psi_{\lambda m}||^2$$

$$||J_-\psi_{\lambda m}||^2 = [\lambda - m(m-1)]||\psi_{\lambda m}||^2 \tag{11.12}$$

А, значит,

$$\begin{cases} \lambda - m(m+1) \geqslant 0, \\ \lambda - m(m-1) \geqslant 0, \end{cases} \Longrightarrow \frac{1}{2} - \sqrt{\Delta} \leqslant m \leqslant -\frac{1}{2} + \sqrt{\Delta}, \tag{11.13}$$

где $\Delta = \frac{1}{4} + \lambda \geqslant \frac{1}{4}$. Положим $j = -\frac{1}{2} + \sqrt{\Delta}$, тогда $\lambda = j(j+1)$, $j \geqslant 0$, и равенства (11.9) можно записать в виде

$$J^2\psi_{jm} = j(j+1)\psi_{jm}$$

$$J_3\psi_{jm} = m\psi_{jm}, \tag{11.14}$$

причем $-j \leqslant m \leqslant j$. Кроме того,

$$\|J_+\psi_{jm}\|^2 = [j(j+1) - m(m+1)]\|\psi_{jm}\|^2$$

$$\|J_-\psi_{jm}\|^2 = [j(j+1) - m(m-1)]\|\psi_{jm}\|^2 \tag{11.15}$$

Можно показать, что собственные значения $m = j$ и $m = -j$ и соответствующие им функции существуют. Тогда

$$J_+\psi_{j,j} = 0 \text{и} J_-\psi_{j,-j} = 0 \tag{11.16}$$

Далее,

$$(J_3J_+ - J_+J_3)\psi_{jm} = J_+\psi_{jm} \Longrightarrow J_3(J_+\psi_{jm}) = (m+1)(J_+\psi_{jm}). \tag{11.17}$$

Значит,

$$\begin{cases} J_+\psi_{jm} = c^{(+)}_{jm}\psi_{j,m+1}, \\ J_-\psi_{jm} = c^{(-)}_{jm}\psi_{j,m-1}. \end{cases} \tag{11.18}$$

Тогда должны существовать такие натуральные n_+ и n_-, что

$$m + n_+ = j \text{и} m - n_- = -j \Longrightarrow 2j = n_+ + n_- \Longrightarrow j = \frac{N}{2}, N = 0, 1, 2, \dots \tag{11.19}$$

$$m = \underbrace{-j, -j+1, \dots, j}_{2j+1}$$

Следовательно,

$$J_\pm\psi_{jm} = [j(j+1) - m(m\pm 1)]^{1/2}\psi_{j,m\pm 1}. \tag{11.20}$$

Вспомним, что $J^2 = J_-J_+ + J_3(J_3+1)$, тогда

$$J^2\psi_{jm} = J_-J_+\psi_{jm} + J_3(J_3+1)\psi_{jm} = [j(j+1) - m(m+1)]^{1/2}J_-\psi_{j,m+1} + (m^2+m)\psi_{jm} =$$

$$= [j(j+1) - m(m+1)]^{1/2}[j(j+1) - (m+1)m]^{1/2}\psi_{j,m} + (m^2+m)\psi_{jm} = j(j+1)\psi_{jm}. \tag{11.21}$$

12 Задача №9b

В состоянии ψ с определенной проекцией момента на ось $Oz, \hat{l}_z\psi = m\psi$, найти средние значения $\langle\hat{l}_x\rangle$, $\langle\hat{l}_y\rangle$, $\langle\hat{l}_x\hat{l}_y\rangle$.

Решение

$$L_x = \frac{1}{2}(L_+ + L_-) \tag{12.1}$$

$$L_y = \frac{1}{2i}(L_+ - L_-) \tag{12.2}$$

$$L_x L_y = \frac{1}{4i}(L_+^2 - L_-^2 - 2L_z) \tag{12.3}$$

Функция ψ является собственным вектором оператора L_z отвечающему собственному значению m. Поэтому

$$(\psi_m, L_x\psi_m) = \frac{1}{2}(\psi_m, (L_+ + L_-)\psi_m) = \frac{1}{2}\left\{(\psi_m, c_m^+\psi_{m+1}) + (\psi_m, c_m^-\psi_{m-1})\right\} = 0. \tag{12.4}$$

Следовательно, $\langle L_x\rangle = \langle L_y\rangle = 0$. А, значит, $\langle l_x\rangle (= \langle L_x/\hbar\rangle) = \langle l_y\rangle = 0$. Учитывая то, что $L_\pm^+ = L_\mp$ имеем

$$(\psi_m, (L_+)^2\psi_m) = (L_-\psi_m, L_+\psi_m) = (c_m^-\psi_{m-1}, c_m^+\psi_{m+1}) = 0 = (\psi_m, (L_-)^2\psi_m). \tag{12.5}$$

Откуда следует, что

$$(\psi, L_xL_y\psi) = -\frac{1}{4i}(\psi, 2L_z\psi) = -\frac{m}{2i} = \frac{i}{2}m \Rightarrow \langle l_x l_y\rangle = \frac{i}{2\hbar^2}m. \tag{12.6}$$

13 Задача

В состоянии ψ с определенными l^2 и l_z, $\hat{l}^2\psi = l(l+1)\psi$, $\hat{l}_z\psi = m\psi$, найти средние значения $\langle\hat{l}_x^2\rangle$, $\langle\hat{l}_y^2\rangle$.

Решение

Поскольку функция $\psi(x)$ является собственным вектором для операторов L^2, L_z, то справедлива следующая цепочка равенств.

$$(\psi, l_x^2\psi) = \left(\psi, \left(\frac{1}{2}(l_+ + l_-)\right)^2\psi\right) = \frac{1}{4}(\psi, l_+l_- + l_-l_+\psi) = \tag{13.1}$$

$$= \frac{1}{4}(l_-\psi, l_-\psi) + \frac{1}{4}(l_+\psi, l_+\psi) =$$

$$= \frac{1}{4}\left\{(l(l+1) - m(m-1)) + (l(l+1) - m(m+1))\right\} = \frac{1}{2}(l(l+1) - m^2)$$

$$(\psi, l_y^2\psi) = \left(\psi, \left(\frac{i}{2}(l_- - l_+)\right)^2\psi\right) = \frac{1}{4}(\psi, l_+l_- + l_-l_+\psi) = \tag{13.2}$$

$$= (\psi, l_x^2\psi) = \frac{1}{2}(l(l+1) - m^2)$$

14 Задача

Найти плотность вероятности различных значений импульса электрона в основном состоянии атома водорода.

Решение

Запишем уравнение Шредингера, соответствующее основному состоянию атома водорода, в сферических координатах:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) - \frac{\alpha}{r} - E\right)\psi = 0. \tag{14.1}$$

Функцию ψ мы будем искать в виде $\psi = Ce^{-\beta r}$. Подставим это выражение в (14.1), получим

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\beta^2 - E + \frac{\hbar^2}{m}\frac{\beta}{r} - \frac{\alpha}{r} = 0. \tag{14.2}$$

Чтобы (14.2) было верно при любых r необходимо, чтобы коэффициенты при всех степенях r равнялись нулю. Т.е. $\beta = \frac{\alpha m}{\hbar^2}$. Введем обозначение $r_B = \frac{1}{\beta}$ (число r_B называется радиусом Бора), тогда

$$E = \frac{\hbar^2}{2mr_B^2} \tag{14.3}$$

Вычислим коэффициент C.

$$C^2\int\limits_{-\pi}^{\pi} d\phi \int\limits_{0}^{\pi} \sin\theta d\theta \int\limits_{0}^{+\infty} r^2 e^{\frac{2r}{r_B}} dr = 1. \tag{14.4}$$

Следовательно,

$$C = \frac{1}{\sqrt{\pi} r_B^{3/2}}. \tag{14.5}$$

Далее,

$$\psi(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \psi(r)\exp\left\{i\frac{\mathbf{pr}}{\hbar}\right\} d\mathbf{r} =$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int\limits_{0}^{\pi}\int\limits_{-\pi}^{\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \psi(r)\exp\left\{i\frac{\mathbf{pr}}{\hbar}\right\} r^2 \sin\theta dr d\phi d\theta =$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\frac{2\pi}{\sqrt{\pi} r^{3/2}}\int\limits_{0}^{\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{-\frac{r}{r_B} + i\frac{pr}{\hbar}\cos\theta\right\} r^2\sin\theta dr d\theta =$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\frac{8r_B^{3/2}\sqrt{\pi}}{(1+p^2r_B^2/\hbar^2)^2}. \tag{14.6}$$

Таким образом

$$\rho(\mathbf{p}) = |\psi(\mathbf{p})|^2 = \frac{8r_B^3}{\pi^2\hbar^3(1+p^2r_B^2/\hbar^2)^4}. \tag{14.7}$$

Спин электрона

До сих пор мы рассматривали электрон как некоторое твердое тело (очень маленьких размеров), имеющее массу m и заряд e. На основании этого предположения было решено множество задач, описывающих свойства микрочастиц. Однако такое представление не является полным, так как существует ряд физических экспериментов, которые показывают, что электрон обладает некоторой внутренней характеристикой. Для более полного описания электрона будем считать, что он представляет собой вращающееся тело вокруг некоторой оси, причем вращаться он может всего в двух направлениях (!) вокруг этой оси. Можно представлять себе электрон как некоторый волчок. В связи с вышесказанным будем представлять полный момент электрона в виде суммы двух моментов: орбитального и собственного.

$$J_i = L_i + S_i, \quad i = 1, 2, 3$$

Здесь J_i — полный момент, L_i — орбитальный момент, соответствующий движению частицы в пространстве, S_i — собственный момент, соответствующий внутреннему состоянию частицы. Собственный момент называют спином. Для математического описания частицы со спином введем двухкомпонентную величину

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix},$$

которая называется спинором. Функция $\psi_1(x)$ соответствует вращению электрона в одну сторону, функция $\psi_2(x)$ — в другую. На функции ψ_1, ψ_2 наложено условие

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (|\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2) dx = 1$$

которое означает, что сумма вероятностей вращения электрона в каждую сторону равна 1 (!). Если ориентация спина не зависит от положения частицы в пространстве, то спинор Ψ имеет вид

$$\Psi = \psi(x) \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}$$

где α_1, α_2 — комплексные числа, и $|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 = 1$.

Опишем структуру S_i. Ясно, что $S_i \in Matr(2\times2)$, так как S_i должны действовать на спинорах. Напишем явный вид операторов S_i, которые, как следует из коммутационных соотношений, являются генераторами группы $SU(2)$:

$$S_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i, \qquad i = 1, 2, 3$$

σ_i называются матрицами Паули.

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Свойства матриц Паули:

$$\sigma_i^2 = 1, \qquad [\sigma_i, \sigma_j]_+ = 2\delta_{ij}, \qquad \sigma_i\sigma_j = \delta_{ij} + e_{ijk}\sigma_k. \tag{14.8}$$

Здесь δ_{ij} — символ Кронекера, e_{ijk} — символ Леви–Чевиты. $[A, B]_+$ — антикоммутатор. По определению он равен $[A, B]_+ = AB + BA$.

Если мы будем рассматривать σ_i как компоненты вектора, то проекции этого вектора на любое направление будут иметь собственные значения ±1.

15 Задача

Электрон находится в состоянии с определенным значением $S_z = \hbar/2$. Найти вероятности возможных значений проекции спина на направление $\mathbf{n} = (\sin\alpha\cos\beta, \sin\alpha\sin\beta, \cos\alpha)$.

Решение

Считаем, что спин не зависит от положения в пространстве, то есть все спиноры в задаче имеют вид

$$\Psi = \psi(x)\begin{pmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\end{pmatrix}$$

Везде ниже будем опускать $\psi(x)$, то есть считаем, что $\Psi = (\alpha_1, \alpha_2)^T$. По условию задачи $S_z\Psi = \hbar/2\Psi$. Это означает, что задан электрон со спинором $(1, 0)^T$. Найдем спинор, описывающий частицу с спином,ориентированным вдоль направления $\mathbf{n}$. Для этого решим следующее уравнение

$$(\boldsymbol{\sigma n})\Psi = \xi\Psi$$

Здесь $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$, $\Psi = (x, y)^T$, $\xi = \pm1$, $\boldsymbol{n} = (n_1, n_2, n_3)$. Получим

$$\begin{pmatrix} n_3 - \xi & n_1 - in_2\\ n1 + in_2 & -n_3 - \xi\end{pmatrix}\Psi = 0$$

Собственные векторы суть

$$v = C\begin{pmatrix} n_3 + \xi\\ n_1 + in_2\end{pmatrix}$$

где C — константа. Действительно, для первой строки матрицы имеем

$$(n_3 - \xi)(n_3 + \xi) + (n_1 - in_2)(n_1 + in_2) = n_3^2 - \xi^2 + n_1^2 + n_2^2 = 1 - \xi^2 = 1 - 1 = 0$$

Для второй строки все очевидно. Нормируем полученные собственные вектора.

$$v^* = C^*\begin{pmatrix} n_3 + \xi\\ n_1 - in_2\end{pmatrix}$$

$(v, v^*) = ((n_3+\xi)^2 + n_1^2 + n_2^2)|C|^2 = 1 \Rightarrow (1+1+2n_3\xi)|C|^2 = 1$. Отсюда

$$|C| = \frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{1+n_3\xi}}$$

$$v = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \sqrt{n_2+\xi} \\ \dfrac{n_1+in_2}{\sqrt{n_3+\xi}} \end{pmatrix} e^{i\phi}$$

Подставим вместо n_1, n_2, n_3 выражения из условия задачи. Получим

$$v = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \sqrt{\cos\alpha \pm 1} \\ \dfrac{\sin\alpha e^{i\beta}}{\sqrt{\cos\alpha \pm 1}} \end{pmatrix}$$

С учетом того, что $1 + n_3\xi = \xi(\xi + n_3)$, получим

$$v_+ = \begin{pmatrix} \cos\alpha/2 \\ e^{i\beta}\sin\alpha/2 \end{pmatrix} e^{i\phi}$$

$$v_- = \begin{pmatrix} -\sin\alpha/2 \\ e^{i\beta}\cos\alpha/2 \end{pmatrix} e^{i\phi}$$

Теперь свернем полученные векторы с вектором $(1, 0)^T$ из начальных данных задачи, получим

$$\alpha_+ = \cos\frac{\alpha}{2}e^{i\phi}$$

$$\alpha_- = -\sin\frac{\alpha}{2}e^{i\phi}$$

А искомые вероятности — это квадраты модулей найденных величин, то есть

$$|\alpha_+|^2 = \cos^2\frac{\alpha}{2}$$

$$|\alpha_-|^2 = \sin^2\frac{\alpha}{2}$$

16 Задача

Используя уравнение Паули, найти спектр энергии электрона в постоянном однородном магнитном поле $\boldsymbol{H} = H\boldsymbol{e}_z$, заданном вектор-потенциалом $\boldsymbol{A} = -yH\boldsymbol{e_x}$.

Решение

Для частицы в магнитном поле Паули постулировал следующее уравнение

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}_p\Psi$$

$$\hat{H}_p = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 - \frac{e\hbar}{2mc}(\boldsymbol{\sigma H})$$

Здесь $\boldsymbol{A}$ — вектор-потенциал магнитного поля, $\boldsymbol{H}$ — вектор магнитного поля, $\boldsymbol{\sigma}$ — вектор, составленный из матриц Паули.

Решение этой задачи напоминает решение задачи для гармонического осциллятора (ГО). Идея решения состоит в том, чтобы выразить $\hat{H}_p$ через операторы рождения и уничтожения и получить ответ. Как и в случае с ГО будем рассматривать стационарные состояния. Будем рассматривать функции

$$\Psi = e^{-iEt}\Psi(x)$$

Уравнение Шредингера для стационарного случая имеет вид

$$\hat{H}_p\Psi_n = E_n\Psi_n$$

Наша задача найти E_n.

Подставим начальные данные в $\hat{H}_p$. Получим

$$\hat{H}_p = \frac{1}{2m}\left\{\left(p_x + \frac{eH}{c}y\right)^2 + p_y^2 + p_z^2\right\} - \frac{e\hbar}{2mc}\sigma_3 H$$

Заменим p_x на $-i\hbar\partial_x$, а p_y на $-i\hbar\partial_y$. Заметим, что p_z оставляем как есть, так как магнитное поле направлено вдоль оси Oz. Получим

$$\frac{1}{2m}\left\{-\hbar^2\partial_x^2 + \frac{e^2H^2}{c^2}y^2 - 2i\hbar\frac{eH}{c}y\partial_x - \hbar^2\partial_y^2 + p_z^2\right\} - \frac{e\hbar}{2mc}\sigma_3 H \tag{16.1}$$

Обезразмерим переменные. Для этого введем

$$\xi_x = \sqrt{\frac{\theta eH}{\hbar c}}x, \quad \xi_y = \sqrt{\frac{\theta eH}{\hbar c}}y$$

Здесь $\theta = \mathrm{sign}(eH)$. Тогда

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sqrt{\frac{\theta eH}{\hbar c}}\frac{\partial}{\partial \xi_x}, \quad \frac{\partial}{\partial y} = \sqrt{\frac{\theta eH}{\hbar c}}\frac{\partial}{\partial \xi_y}$$

Подставив это в (16.1) и обозначив $\omega_c = \frac{\theta eH}{mc}$, получим

$$\frac{\omega_c\hbar}{2}(-\partial_{\xi_x}^2 - 2i\theta\partial_{\xi_x}\xi_y + \xi_y^2 - \partial_{\xi_y}^2) + \frac{p_z^2}{2m} \mp \frac{\omega_c\hbar}{2}$$

Введем

$$a = (-i\theta\partial_{\xi_x} + \xi_y + \partial_{\xi_y})\frac{1}{\sqrt{2}}, \quad a^+ = (-i\theta\partial_{\xi_x} + \xi_y - \partial_{\xi_y})\frac{1}{\sqrt{2}}$$

Покажем, что $a^* = a^+$ и $[a, a^+]_- = 1$. Здесь a^* — эрмитово сопряжение оператора a.

$$\sqrt{2}(a\phi, \psi) = \iint_{-\infty}^{+\infty}\left(-i\theta\frac{\partial\phi}{\partial_{\xi_x}} + \xi_y\phi + \frac{\partial\phi}{\partial_{\xi_y}}\right)\tilde{\psi}d\xi_x d\xi_y =$$

$$-i\theta\phi\psi|_{-\infty}^{+\infty} + i\theta\iint_{-\infty}^{+\infty}\phi\frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial_{\xi_x}}d\xi_x d\xi_y + i\phi\psi|_{-\infty}^{+\infty} - \iint_{-\infty}^{+\infty}\phi\frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial_{\xi_y}}d\xi_x d\xi_y + \iint_{-\infty}^{+\infty}\xi_y\phi\tilde{\psi}d\xi_x d\xi_y =$$

$$\iint_{-\infty}^{+\infty} \phi \overline{\left(-i\theta\frac{\partial}{\partial_{\xi_x}} + \xi_y - \frac{\partial}{\partial_{\xi_y}}\right)\psi} d\xi_x d\xi_y = (\phi, a^*\psi)\sqrt{2}$$

Теперь посчитаем коммутатор

$$[a, a^+]_-\psi = (aa^+ - a^+a)\psi$$

Вычислим отдельно aa^+ и a^+a.

$$aa^+\psi = \frac{1}{2}(-i\theta\partial_{\xi_x} + \xi_y + \partial_{\xi_y})(-i\theta\partial_{\xi_x} + \xi_y - \partial_{\xi_y})\psi = \frac{1}{2}\left(-\frac{\partial^2\psi}{\partial\xi_x^2} - i\xi_y\theta\frac{\partial\psi}{\partial\xi_x} + i\theta\frac{\partial^2\psi}{\partial\xi_x\partial\xi_y} -\right.$$

$$\left. i\theta\xi_y\frac{\partial\psi}{\partial\xi_x} + \xi_y^2\psi - \xi_y\frac{\partial\psi}{\partial\xi_y} - i\theta\frac{\partial^2\psi}{\partial\xi_x\partial\xi_y} + \psi + \xi_y\frac{\partial\psi}{\partial\xi_y} - \frac{\partial^2\psi}{\partial\xi_y^2}\right) =$$

$$\frac{1}{2}\left(-\partial^2_{\xi_x} - 2\theta i\xi_y\partial_{\xi_x} + \xi_y^2 + 1 - \partial^2_{\xi_y}\right)\psi$$

Аналогично

$$a^+a\psi = \frac{1}{2}\left(-\partial^2_{\xi_x} - 2\theta i\xi_y\partial_{\xi_x} + \xi_y^2 - 1 - \partial^2_{\xi_y}\right)\psi$$

Таким образом

$$[a, a^+]\psi = \psi$$

Итак, показали, что $a^* = a^+$ и $[a, a^+]_- = 1$, а значит попали в условия задачи о ГО. Из задачи о ГО известно, что собственные значения оператора a^+a суть числа $0, 1, 2, \dots$. Теперь, выразив оператор $\hat{H}_p$ через оператор a^+a, имеем

$$\hat{H}_p = \hbar\omega_c\left\{a^+a + \frac{1}{2}\right\} \mp \frac{\hbar\omega_c}{2} + \frac{p_z^2}{2m}.$$

Таким образом, приходим к ответу

$$E_n = \hbar\omega_c\left\{n + \frac{1}{2}(1-\xi)\right\} + \frac{p_z^2}{2m},$$

где $\xi = \pm 1$, $n = 0, 1, 2, \dots$.

17 Задача

Вычислить статистический вес состояния с энергией E системы N независимых осцилляторов частоты ω. Найти теплоемкость системы как функцию температуры T.

Решение:

Введем понятие статистического веса.

Состояние системы в целом характеризуется рядом параметров (например, P, V, E). При этом, каждое макросостояние обусловлено состояниями всех образующих систему частиц — микросостояниями, задаваемыми значениями координат и скоростей атомов и молекул системы. Следовательно, каждое макросостояние может быть реализовано различными способами.

Также будем полагать, что любой набор микроскопических параметров, определяющих данное макросостояние, равновероятен. Таким образом, вероятность нахождения системы в определенном микросостоянии определяется количеством вариантов, которыми можно получить данное макросостояние.

Статистический вес $\varGamma$ — есть число способов, которыми может быть реализовано данное макросостояние.

Определение 2. *В соответствии с вышеизложенным, статистическим весом состояния системы с энергией E будет называться количество различных микросостояний системы, которыми можно реализовать данное макросостояние.*

Определение 3. *Вводят понятие энтропии $S = k \ln \varGamma$. При этом, температура и теплоемкость определяются следующим образом:*

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} \quad C_V = -\frac{\partial E}{\partial T} \tag{17.1}$$

Перейдем к решению поставленной задачи.

Отметим, что каждый осциллятор в отдельности имеет уровни энергии:

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

В силу независимости осцилляторов, полная энергия системы есть сумма энергий составляющих её осцилляторов.

$$E = \sum E_{n_i} = \frac{N}{2}\hbar\omega + \hbar\omega(n_1 + \cdots + n_N)$$

В данном выражении определяющей является сумма $n_1 + \cdots + n_N$. Количество вариантов в результате такого суммирования получить наперед заданное число m и есть статистический вес состояния с энергией $E = \hbar\omega(m + N/2)$, и может быть вычислено, используя комбинаторную формулу:

$$\varGamma = \frac{(m + N - 1)!}{m!(N - 1)!}. \tag{17.2}$$

Преобразуем данную формулу в соответствии с формулой Стирлинга $n! \approx n^n e^{-n}\sqrt{2\pi n}$:

$$\varGamma = \frac{e^{-(m+N-1)(\ln(m+N-1)-1)}}{e^{-m(\ln(m)-1)}e^{-(N-1)(\ln(N-1)-1)}}\frac{\sqrt{m+N-1}}{\sqrt{2\pi m}\sqrt{N-1}} =$$

$$= \frac{\sqrt{m+N-1}}{\sqrt{2\pi m}\sqrt{N-1}}e^{-(m+N-1)(\ln(m+N-1)-1)+(N-1)(\ln(N-1)-1)+m(\ln(m)-1)}$$

Тогда

$$\ln\varGamma = \ln\left(\frac{\sqrt{m+N-1}}{\sqrt{2\pi m}\sqrt{N-1}}\right) - (m+N-1)(\ln(m+N-1)-1) + (N-1)(\ln(N-1)-1) + m(\ln(m)-1)$$

Запишем выражение для S, оставив только главные члены выражения, принимая во внимание то, что N и m достаточно большие:

$$S = k \ln \Gamma = k[(-(m+N)\ln(m+N) + N\ln N + m\ln m]. \tag{17.3}$$

Теперь вычислим температуру, воспользовавшись формулой (17.1).

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E}$$

Напомним, что энергия E системы равна $\hbar\omega(m+N/2)$. В рассматриваемом случае N считается постоянной, а m переменной величиной, таким образом, получаем:

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{\partial S}{\partial m}\left(\frac{\partial E}{\partial m}\right)^{-1} = \frac{k}{\hbar\omega}(-\ln(m+N) + \ln m) = -\frac{k}{\hbar\omega}\ln\left(\frac{m+N}{m}\right).$$

Выражаем m через E и получаем:

$$\frac{1}{T} = -\frac{k}{\hbar\omega}\ln\frac{E+N/2\hbar\omega}{E-N/2\hbar\omega}. \tag{17.4}$$

Выражаем из полученного равенства E через T:

$$e^{-\hbar\omega/kT} = \frac{E+N/2\hbar\omega}{E-N/2\hbar\omega} \Rightarrow E(1-e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}) = \frac{N}{2}\hbar\omega(1+e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}) \Rightarrow$$

$$E(T) = \frac{N}{2}\hbar\omega\frac{1+e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}}{1-e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}} = N\left(\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}-1}\right). \tag{17.5}$$

Теперь вычислим теплоемкость, пользуясь формулой (17.1).

$$C_V = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{\partial N\frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}-1}}{\partial T} = -\frac{\partial(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}})}{\partial T}\frac{N\hbar\omega}{(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}-1)^2} = \frac{\frac{1}{T^2}N\frac{\hbar\omega}{k}e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}\hbar\omega}{(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}-1)^2} = N\frac{(\hbar\omega)^2}{k}\frac{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}}{(T(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}-1))^2}.$$

$$C_V = N\frac{(\hbar\omega)^2}{4kT^2}\,\mathrm{sh}^{-2}\left(\frac{\hbar\omega}{2kT}\right). \tag{17.6}$$

Заметим, что температура системы также была найдена, см. формулу (17.4).

18 Задача

Вычислить статистическую сумму системы N независимых осцилляторов частоты ω при температуре T и найти теплоемкость системы.

Решение:

Термодинамические свойства классической системы, состоящей из N одинаковых частиц и занимающей объем V при температуре T, полностью определяются канонической статистической суммой:

$$Z = \sum_n e^{-\frac{E_n}{kT}} \quad \text{, здесь берется сумма по всем различным микросостояниям системы.} \tag{18.1}$$

Утверждение 4. *Для системы, состоящей из N одинаковых, независимых частей, её статистическая сумма может быть записана, как* $Z = (Z_0)^N$*, если эти части различимы (пронумерованы).*

Определение 4. *Введем понятие свободной энергии F (свободная энергия в смысле Гельмгольца):* $F = E - TS$.

Отметим, что свободная энергия может быть вычислена через статистическую сумму Z:

$$F = -kT \ln Z. \tag{18.2}$$

Также, в силу определения, величина энтропии может быть выражена через F следующим образом:

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T}. \tag{18.3}$$

Для случая различимых частиц получаем равенство $F = -NkT \ln Z_0$.

Вычислим $E(T)$ для случая, когда части системы различимы:

$$F = NkT \left(\ln(2 \operatorname{sh} \frac{\hbar\omega}{2kT} \right).$$

Заметим, что $F = E - TS$, следовательно $E = F + TS$. Выражаем S через F: $S = -\frac{\partial F}{\partial T}$.

$$E = F - T\frac{\partial F}{\partial T} = -NkT^2 \left(\frac{\partial}{\partial T} \ln \left(2 \operatorname{sh} \frac{\hbar\omega}{2kT} \right) \right).$$

$$E = -NkT^2 \frac{-2 \operatorname{ch} \frac{\hbar\omega}{2kT}}{2 \operatorname{sh} \frac{\hbar\omega}{2kT}} \left(\frac{\hbar\omega}{2kT^2} \right) = \frac{N\hbar\omega}{2} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2kT}.$$

Теперь вычислим теплоемкость системы:

$$C_V = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{N\hbar\omega}{2} \frac{\hbar\omega}{2kT^2} \frac{1}{\operatorname{sh}^2 \frac{\hbar\omega}{2kT}} = \frac{N(\hbar\omega)^2}{2kT^2 \operatorname{sh}^2(\frac{\hbar\omega}{4kT})}. \tag{18.4}$$