

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный  
технический университет»

**И.М. Шушлебин Л.И. Янченко**

**КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА  
В ЗАДАЧАХ И ВОПРОСАХ**

Утверждено учебно-методическим советом  
университета в качестве учебного пособия

Воронеж 2018

УДК 530.145.6(075.8)

ББК 22.36 Я7

Ш 986

***Рецензенты:***

кафедра физики полупроводников и микроэлектроники  
Воронежского государственного университета  
(зав. кафедрой д-р физ.- мат. наук, проф. Бормонтов Е.Н.);  
канд. физ.-мат. наук, проф. кафедры высшей математики  
и физ.-мат. моделирования ВГТУ Г.Е. Шунин

**Шушлебин, И.М.**

Квантовая механика в задачах и вопросах: учеб. посо-  
Ш 986 бие / И.М. Шушлебин, Л.И. Янченко. - Воронеж:  
ФГБОУ ВО «Воронежский государственный техниче-  
ский университет», 2018. – 83 с.

**ISBN**

Учебное пособие включает ряд задач по основным раз-  
делам квантовой механики.

Учебное пособие составлено в соответствии с федераль-  
ным государственным образовательным стандартом высшего  
образования по программе курса «Квантовая механика» и  
предназначено для студентов направления подготовки  
16.03.01 «Техническая физика» (направленность «Физическая  
электроника»), 14.03.01 «Ядерная энергетика и теплофизика»  
(направленность «Ядерная энергетика и теплофизика») и  
28.03.01 «Нанотехнологии и микросистемная техника» (на-  
правленность «Компоненты микро- и наносистемной техни-  
ки»).

Ил. 6. Библиогр.: 16 назв.

**ISBN**

© Шушлебин И.М., Янченко Л.И., 2018  
© ФГБОУ ВО «Воронежский государ-  
ственный технический универси-  
тет», 2018

## ВВЕДЕНИЕ

В начале XX в. были обнаружены две группы явлений, свидетельствующих о неприменимости механики Ньютона и классической электродинамики к процессам взаимодействия света с веществом и к процессам, происходящим в атоме. Первая группа явлений была связана с установлением на опыте двойственной природы света – дуализмом света, вторая – с невозможностью объяснить на основе классических представлений существование устойчивых атомов, а также их оптические спектры.

Впервые квантовые представления были введены в 1900 г. Планком в работе, посвященной теории теплового излучения тел. К тому времени классическая электродинамика не могла объяснить и построить правильную теорию теплового излучения. Планк разрешил это противоречие и получил результат, прекрасно согласующийся с опытом. При этом он предположил, что свет испускается не непрерывно, а определенными дискретными порциями энергии – квантами.

Развивая идею Планка, Альберт Эйнштейн при создании теории фотоэффекта предположил, что свет не только испускается и поглощается, но и распространяется квантами, т.е. дискретность присуща самому свету: свет состоит из отдельных порций – световых квантов, названных позднее фотонами.

Дальнейшее доказательство корпускулярного характера света было получено в 1922 г. Комптоном, показавшим экспериментально, что при рассеянии рентгеновских лучей свободными электронами происходит изменение их частоты в соответствии с законами упругого столкновения двух частиц – фотона и электрона. Тем самым было доказано экспериментально, что наряду с известными волновыми свойствами (проявляющимися в интерференции, дифракции и поляризации) свет обладает и корпускулярными свойствами. В этом состоит дуализм света – корпускулярно-волновая природа света.

В 1924 г. Луи де Бройль выдвинул гипотезу о всеобщности корпускулярно-волнового дуализма, пытаясь объяснить условия квантования атомных орбит. Согласно де Бройлю, каждой частице, независимо от природы, следует поставить в соответствие волну. По этой гипотезе не только фотоны, но и частицы (электроны, протоны и др.) обладают волновыми свойствами, которые, в частности, должны проявляться в дифракции частиц.

В 1927 г. Дэвиссон и Джермер впервые наблюдали дифракцию электронов. Позднее волновые свойства были обнаружены и у других частиц – справедливость гипотезы де Бройля была доказана экспериментально.

В 1926 г. Шредингер предложил уравнение, описывающее поведение таких «волн» во внешних силовых полях. Волновое уравнение Шредингера является основным уравнением нерелятивистской квантовой механики.

В 1928 г. Дирак сформулировал релятивистское уравнение, описывающее движение электрона во внешнем силовом поле. Уравнение Дирака стало одним из основных уравнений релятивистской квантовой механики.

Используя гипотезу Планка, в 1907 г. Эйнштейном опубликована работа, посвященная теории теплоёмкости твердых тел. Теория Эйнштейна, уточненная Дебаем, Борном и Карманом, сыграла выдающуюся роль в развитии теории твердых тел.

В 1913 г. Бор применил идею квантования энергии к планетарной модели строения атома, которая вытекала из результатов опытов Резерфорда. Бор для объяснения устойчивости атомов предположил, что излучение энергии электроном в атоме подчиняется квантовым законам, то есть происходит дискретными порциями. Он постулировал, что из всех орбит, допускаемых ньютоновской механикой, для движения электрона в электрическом поле атомного ядра, реально осуществляются лишь те, которые удовлетворяют определенным усло-

виям квантования. Им отвечают определённые уровни энергии.

Существование дискретных уровней энергии в атомах было непосредственно установлено в опытах Франка и Герца в 1913 – 1914 годах.

В 1927 г. в работе Гейзенберга было сформулировано соотношение неопределенностей – важнейшее соотношение, осяцающее физический смысл уравнений квантовой физики, её связь с классической наукой и ряд других принципиальных вопросов.

Анализ спектров привел Уленбека и Гаудсмита к представлению о том, что электрону кроме заряда и массы должна быть приписана ещё одна внутренняя характеристика – спин.

Важную роль сыграл открытый в 1925 г. Паули принцип запрета, имеющий фундаментальное значение в теории атомов, молекул, ядер, твердых тел.

Таким образом, квантовая механика – раздел физики, изучающий способы описания и законы поведения физических систем, для которых величины, характеризующие систему, оказываются сравнимыми с постоянной Планка  $h$  ( $h = 6,62 \cdot 10^{-34}$  Дж·с). Этому условию удовлетворяет, как правило, движение микрочастиц (электронов в атоме, атомов в молекулах, нуклонов в ядрах и т.п.). Однако в некоторых случаях специфическими квантовыми свойствами обладают макроскопические системы как целое.

Настоящее пособие предназначается для практических занятий и самостоятельной работы по курсу «Квантовая механика».

Пособие охватывает следующие вопросы курса: квантовые состояния и их волновые функции, физические величины и их операторы, измеримость физических величин, гамильтониан и интегралы движения.

# 1. ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ДЛЯ ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАНЯТИЙ

## Практическое занятие № 1. Системы ортогональных функций

**Пример 1.** Вычислить интегралы:

$$\int_{-\pi}^{\pi} \cos nx \, dx \quad \text{и} \quad \int_{-\pi}^{\pi} \sin nx \, dx, \quad \text{где } n - \text{целое число.}$$

**Решение.**

$$1) \quad \int_{-\pi}^{\pi} \cos nx \, dx = \left. \frac{\sin nx}{n} \right|_{-\pi}^{\pi} = 0, \quad n \neq 0, \quad \text{при } n = 0$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} dx = 2\pi.$$

$$2) \quad \int_{-\pi}^{\pi} \sin nx \, dx = \left. -\frac{\cos nx}{n} \right|_{-\pi}^{\pi} = 0, \quad n \neq 0,$$

$$\text{при } n = 0 \quad \int_{-\pi}^{\pi} 0 \cdot dx = 0.$$

**Пример 2.** Вычислить интегралы:

$$\int_{-\pi}^{\pi} \cos mx \cdot \cos nx \, dx; \quad \int_{-\pi}^{\pi} \sin mx \cdot \sin nx \, dx \quad \text{и}$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \sin mx \cdot \cos nx \, dx, \quad \text{m и n - целые положительные числа.}$$

Использовать формулы:

$$1) 2 \cos mx \cos nx \, dx = \cos(m-n)x + \cos(m+n)x ;$$

$$2) 2 \sin mx \sin nx \, dx = \cos(m-n)x - \cos(m+n)x ;$$

$$3) 2 \sin mx \cos nx \, dx = \sin(m-n)x + \sin(m+n)x .$$

**Решение.**

$$1) \int_{-\pi}^{\pi} \cos mx \cdot \cos nx \, dx = \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \cos(m-n)x \, dx + \\ + \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \cos(m+n)x \, dx = \begin{cases} 0, & \text{при } m \neq n \\ \pi, & \text{при } m = n \end{cases}$$

(Согласно п.1 предыдущей задачи, по первому интегралу, второй также 0).

$$2) \int_{-\pi}^{\pi} \sin mx \cdot \sin nx \, dx = \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \cos(m-n)x \, dx - \\ - \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \cos(m+n)x \, dx = \begin{cases} 0, & \text{при } m \neq n \\ \pi, & \text{при } m = n \end{cases} .$$

$$3) \int_{-\pi}^{\pi} \sin mx \cdot \cos nx \, dx = \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \sin(m-n)x \, dx + \\ + \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \sin(m+n)x \, dx = 0 .$$

**Пример 3.** Допустим, что функция  $f(x)$  представлена в виде  $f(x) = \sum_{k=1}^{\infty} (a_k \cos kx + b_k \sin kx)$ . Найти коэффициенты разложения  $a_n$  и  $b_n$ .

**Решение.**

1) Умножим обе части выражения на  $(\cos nx)$  и проинтегрируем от  $-\pi$  до  $\pi$ :

$$\int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cos nx \, dx = \sum_{k=1}^{\infty} \left( a_k \int_{-\pi}^{\pi} \cos kx \cdot \cos nx \, dx + b_k \int_{-\pi}^{\pi} \sin kx \cdot \cos nx \, dx \right) = a_n \pi, \text{ так как}$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \cos kx \cdot \cos nx \, dx = \begin{cases} \pi, & \text{при } k = n; \\ 0, & \text{при } k \neq n; \end{cases} \Rightarrow$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \sin kx \cdot \cos nx \, dx = 0 \text{ в любом случае.}$$

Отсюда следует, что

$$a_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cos nx \, dx.$$

2) Умножим на  $\sin nx$  и интегрируем в тех же пределах



$$\int_{-\pi}^{\pi} f(x) \sin nx \, dx = \sum_{k=1}^{\infty} \left( a_k \int_{-\pi}^{\pi} \cos kx \cdot \sin nx \, dx + b_k \int_{-\pi}^{\pi} \sin kx \cdot \sin nx \, dx \right) = b_n \pi$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \sin kx \cdot \sin nx \, dx = \begin{cases} \pi, & \text{при } k = n; \\ 0, & \text{при } k \neq n; \end{cases} \Rightarrow$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \cos kx \cdot \sin nx \, dx = 0 \text{ в любом случае.}$$

Отсюда следует, что

$$b_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \sin nx \, dx.$$

**Пример 4.** Проверить операторное равенство

$$\frac{d}{dx} x = 1 + x \frac{d}{dx}.$$

**Решение.**

$$\frac{d}{dx} [x \cdot \Psi(x)] = \Psi(x) + x \frac{d\Psi}{dx} \Rightarrow 1 + x \frac{d}{dx}.$$

**Пример 5.** Проверить операторное равенство

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

**Решение.**

$$x^2 \frac{d}{dx} \left( \frac{1}{x} \Psi \right) = x^2 \left( -\frac{1}{x^2} \Psi + \frac{1}{x} \frac{d\Psi}{dx} \right) \Rightarrow x \frac{d}{dx} - 1.$$

**Пример 6.** Проверить операторное равенство

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

**Решение.**

$$\left(1 + \frac{d}{dx}\right)\left(1 + \frac{d}{dx}\right)\Psi = \left(1 + \frac{d}{dx}\right)\left(\Psi + \frac{d\Psi}{dx}\right) \Rightarrow 1 + 2\frac{d}{dx} + \frac{d^2}{dx^2}$$

**Пример 7.** Найти собственные функции оператора  $\hat{A} = -\frac{d^2}{dx^2}$ , принадлежащие собственной функции  $\Psi_A = \sin 2x$ .

**Решение.**

$$\hat{A}\Psi = A\Psi \Rightarrow -2\cos 2x \Rightarrow 4\sin 2x = A\sin 2x \Rightarrow$$

$$A = 4$$

**Пример 8.** Найти собственные функции и собственные значения оператора  $\hat{A} = -\frac{d^2}{dx^2}$ , если  $\Psi = 0$ , при  $x = 0$  и  $x = \ell$ .

**Решение.**

$$-\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \lambda\Psi \Rightarrow \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \lambda\Psi = 0;$$

$$\chi^2 + \lambda = 0; \chi = \pm i\sqrt{\lambda};$$

$$\Psi = e^{\pm 0} C_1 \cos \sqrt{\lambda} x + C_2 \sin \sqrt{\lambda} x \Rightarrow$$

$$\Psi = C_1 \cos \sqrt{\lambda} x + C_2 \sin \sqrt{\lambda} x.$$

$$x = 0; \Psi(0) = 0 \Rightarrow C_1 \cdot 1 + C_2 \cdot 0 = 0 \Rightarrow C_1 = 0, C_2 = 0.$$

$$x = \ell; \Psi(\ell) = 0; C \neq 0;$$

$$\Psi = C \cdot \sin \sqrt{\lambda} x = \sin \sqrt{\lambda} \ell = 0 \Rightarrow \sqrt{\lambda} \ell = \pi n, n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

(ноль отбрасывается как тривиальное решение  $n = 1, 2, 3, \dots$ )  $\Rightarrow$

$$\lambda = \frac{\pi^2 n^2}{e^2}; \quad (\text{квантование})$$

$$\Psi_n = C \sin\left(\frac{\pi n}{e} x\right).$$

## Практическое занятие № 2

**Задача 1.** Показать, что, если операторы  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  являются линейными, то операторы  $\hat{A} + \hat{B}$  и  $\hat{A}\hat{B}$  также линейные.

Условия линейности

$$\hat{A}(C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2) = \hat{A} C_1 \Psi_1 + \hat{A} C_2 \Psi_2;$$

$$\hat{B}(C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2) = \hat{B} C_1 \Psi_1 + \hat{B} C_2 \Psi_2.$$

**Решение.**

$$\begin{aligned} 1) (\hat{A} + \hat{B})(C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2) &= \hat{A}(C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2) + \\ &+ \hat{B}(C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2) = C_1 \hat{A} \Psi_1 + C_2 \hat{A} \Psi_2 + \\ &+ C_1 \hat{B} \Psi_1 + C_2 \hat{B} \Psi_2 = C_1(\hat{A} \Psi_1 + \hat{B} \Psi_1) + \\ &+ C_2(\hat{A} \Psi_2 + \hat{B} \Psi_2) = C_1(\hat{A} + \hat{B})\Psi_1 + C_2(\hat{A} + \hat{B})\Psi_2 \\ 2) \hat{A}\hat{B}(C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2) &= \hat{A}(C_1 \hat{B} \Psi_1 + C_2 \hat{B} \Psi_2) = \\ &= C_1 \hat{A} \hat{B} \Psi_1 + C_2 \hat{A} \hat{B} \Psi_2. \end{aligned}$$

**Задача 2.** Показать, что собственные значения эрмитова оператора вещественны (и средние).

**Решение.**

Вещественность собственных значений, означает, что  $L_n = L_n^*$ . В самом деле, собственное значение  $L_n$  по сути - это среднее значение в собственном состоянии  $\Psi_n$ .

$$\begin{aligned} \langle L_n \rangle &= \int \Psi_n^* \cdot \hat{L} \cdot \Psi_n dq = \int \Psi_n^* \cdot L_n \cdot \Psi_n dq = \\ &= L_n \int \Psi_n^* \cdot \Psi_n dq \equiv L_n. \end{aligned}$$

При  $\varphi_1 = \Psi^*$  и  $\varphi_2 = \Psi$  условие эрмитовости дает

$$L_n = \int \Psi^* \cdot \hat{L} \cdot \Psi dq = \int \Psi \cdot \hat{L}^* \cdot \Psi^* dq \equiv \langle L^* \rangle \Rightarrow \\ \langle L \rangle = \langle L^* \rangle,$$

что и доказывает вещественность средних значений и, как частный случай, собственных значений.

**Задача 3.** Доказать коммутационное соотношение.

$$[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}]$$

**Решение.**

$$[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = (\hat{A} \cdot (\hat{B} + \hat{C}) - (\hat{B} + \hat{C}) \cdot \hat{A}) = (\hat{A}\hat{B} + \hat{A}\hat{C} - \hat{B}\hat{A} - \hat{C}\hat{A}) = \\ = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} + \hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A} = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}]$$

**Задача 4.** Доказать, что если коммутатор  $[\hat{A}, \hat{B}] = 1$ , то  $[\hat{A}, \hat{B}^2] = 2\hat{B}$ .

**Решение.**

По условию  $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 1$ .

Умножим равенство  $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 1$  на  $\hat{B}$  сначала слева

$$\hat{B}\hat{A}\hat{B} - \hat{B}^2\hat{A} = \hat{B};$$

затем справа

$$\hat{A}\hat{B}^2 - \hat{B}\hat{A}\hat{B} = \hat{B}.$$

После сложения получим

$$\hat{A}\hat{B}^2 - \hat{B}^2\hat{A} = 2\hat{B} \Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}^2] = 2\hat{B}.$$

**Задача 5.** Доказать следующие теоремы:

а) Если операторы  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  имеют общие собственные функции, то такие операторы коммутируют.

б) Если операторы  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  коммутируют, то они имеют общие собственные функции (без вырождения).

**Решение.**

а) Если  $\Psi$  - общая собственная функция операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$ , то

$$\left. \begin{aligned} \hat{A}\hat{B}\Psi = \hat{A}\hat{B}\Psi = \hat{B}\hat{A}\Psi = \hat{B}\hat{A}\Psi \\ \hat{B}\hat{A}\Psi = \hat{B}\hat{A}\Psi = \hat{A}\hat{B}\Psi = \hat{A}\hat{B}\Psi \end{aligned} \right\} \Rightarrow \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = [\hat{A}, \hat{B}] = 0.$$

б) Пусть  $\Psi$  - собственная функция оператора  $\hat{A}$ . Из коммутативности операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  следует, что

$$\begin{aligned} \hat{A}\hat{B}\Psi = \hat{B}\hat{A}\Psi = \hat{B}\hat{A}\Psi = \hat{A}\hat{B}\Psi \Rightarrow \\ \Rightarrow \hat{A}(\hat{B}\Psi) = \hat{A}\hat{B}\Psi = \hat{A}\Psi' = \Lambda\Psi', \end{aligned}$$

где  $\Psi' = \hat{B}\Psi \Rightarrow \Psi'$  - также собственная функция оператора  $\hat{A}$  с собственным значением  $\Lambda$ .

Отсюда следует, что собственное значение  $\Lambda$  принадлежит и  $\Psi$ , и  $\Psi'$ , которые, следовательно, описывают одно квантовое состояние. Но тогда между  $\Psi$  и  $\Psi'$  не может быть отличий принципиальнее постоянного множителя, например

В:  $\Psi' = \hat{B}\Psi$ . Но  $\Psi' = \hat{B}\Psi \Rightarrow \hat{B}\Psi = B\Psi \Rightarrow \Psi$  – обшая  
 собственная функция операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$ .

**Задача 6.** В некотором состоянии квантовая система  $\Psi_A$  имеет определенные значения физической величины  $A$ . Имеет ли в этом состоянии определённое значение также и величина  $B$ , если соответствующие им операторы  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  коммутативны?

**Ответ:** Только в том случае, если  $\Psi_A$  одновременно является и собственной функцией  $B$ . В общем же случае – нет. Это случай вырождения.

**Задача 7.** Доказать, что если операторы  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  эрмитовы и коммутирующие, то оператор  $\hat{A}\hat{B}$  тоже эрмитов.

**Решение.**

Из условия эрмитовости операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  следует:

$$\begin{aligned} \int \Psi_1^* \hat{A} (\hat{B} \Psi_2) dq &= \int \hat{B} \Psi_2 \cdot \hat{A}^* \Psi_1^* dq = \\ &= \int \hat{A}^* \Psi_1^* \cdot \hat{B} \Psi_2 dq = \int \Psi_2 \hat{B}^* \hat{A}^* \Psi_1^* \cdot dq. \end{aligned}$$

Из коммутативности  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  ( $\hat{A}^* \hat{B}^* = \hat{B}^* \hat{A}^*$ ) следует:

$$\begin{aligned} \int \Psi_1^* \hat{A} \hat{B} \Psi_2 dq &= \int \Psi_2 \hat{B}^* \hat{A}^* \Psi_1^* \cdot dq \equiv \\ &\equiv \int \Psi_2 \hat{A}^* \hat{B}^* \Psi_1^* \cdot dq - \text{условие эрмитовости.} \end{aligned}$$

**Задача 8.** Найти собственные функции и собственные значения операторов  $\frac{d}{dx}$  и  $i\frac{d}{dx}$ .

**Решение.**

$$1) \frac{d\Psi}{dx} = \lambda\Psi \Rightarrow \Psi = ce^{\lambda x}.$$

При  $x \rightarrow \pm\infty$   $\Psi$  должно быть конечно, следовательно,  $\lambda = i\beta$  – чисто мнимое число;  $\beta = \forall$  – действительное число.

$$2) i\frac{d\Psi}{dx} = \lambda\Psi \Rightarrow \Psi = ce^{-i\lambda x}, \text{ где } \lambda = \forall;$$

$$\frac{d\Psi}{dx} = -i\lambda\Psi \text{ - спектр непрерывный.}$$

**Задача 9.** Найти собственные функции и собственные значения оператора  $x + \frac{d}{dx}$ .

**Решение.**

$$\left(x + \frac{d}{dx}\right)\Psi = \lambda\Psi \Rightarrow \frac{d\Psi}{dx} = (\lambda - x)\Psi;$$

$$\frac{d\Psi}{\Psi} = (\lambda - x)dx \Rightarrow \ln \Psi = \lambda x - \frac{x^2}{2} + c'.$$

Оператор не эрмитов, его собственные значения комплексные



$$\Psi = c \cdot e^{\lambda x - \frac{x^2}{2}} \text{ для } \forall \lambda \quad (\text{комплексн.})$$

**Задача 10.** Найти собственные функции и собственные значения оператора  $\frac{d}{d\varphi}$ .

**Решение.**

$$\frac{d\Psi}{d\varphi} = \lambda\Psi \Rightarrow \Psi = c \cdot e^{\lambda\varphi};$$

$$\Psi(\varphi) = \Psi(\varphi + 2\pi) \Rightarrow e^{\lambda 2\pi} = 1 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \lambda = im, m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

**Задача 11.** Доказать, что оператор  $\hat{M}^2$  коммутирует с  $\forall \hat{M}_i$ .

**Решение.**

Приведем доказательство на примере  $\hat{M}_x$ .

$$\begin{aligned} \hat{M}^2 \hat{M}_x - \hat{M}_x \hat{M}^2 &= (M_x^2 + M_y^2 + M_z^2) \hat{M}_x - \hat{M}_x (M_x^2 + M_y^2 + M_z^2) = \\ &= \hat{M}_y^2 \hat{M}_x + \hat{M}_z^2 \hat{M}_x - M_x \hat{M}_y^2 - \hat{M}_x M_z^2. \end{aligned}$$

Прибавим и вычтем  $M_y M_x M_y$  и  $M_z M_x M_z$ :

$$\underline{\hat{M}_y \hat{M}_y \hat{M}_x} + \underline{\hat{M}_z \hat{M}_z \hat{M}_x} - \underline{\hat{M}_x \hat{M}_y \hat{M}_y} - \underline{\hat{M}_x \hat{M}_z \hat{M}_z} +$$

$$\begin{aligned}
& +\hat{M}_y\hat{M}_x\hat{M}_y - \hat{M}_y\hat{M}_x\hat{M}_y + \hat{M}_z\hat{M}_x\hat{M}_z - \hat{M}_z\hat{M}_x\hat{M}_z = \\
& = \hat{M}_y(\hat{M}_y\hat{M}_x - \hat{M}_x\hat{M}_y) + \hat{M}_z(\hat{M}_z\hat{M}_x - \hat{M}_x\hat{M}_z) + \\
& + (\hat{M}_y\hat{M}_x - \hat{M}_x\hat{M}_y)\hat{M}_y + (\hat{M}_z\hat{M}_x - \hat{M}_x\hat{M}_z)\hat{M}_z = \\
& = -i\hbar\hat{M}_y\hat{M}_z + i\hbar\hat{M}_z\hat{M}_y - i\hbar\hat{M}_z\hat{M}_y + i\hbar\hat{M}_y\hat{M}_z = 0
\end{aligned}$$

### Практическое занятие № 3

**Задача 1.** Найти собственные значения и нормированные собственные функции оператора  $\hat{M}_z$ .

**Решение.**

Уравнение  $\hat{M}_z\Psi = M_z\Psi$  имеет решение

$$\Psi = A \cdot \exp\left(\frac{iM_z\varphi}{\hbar}\right) M_z\Psi.$$

Из требования однозначности  $\Psi(\varphi) = \Psi(\varphi + 2\pi) \Rightarrow$

$$Ae^{\frac{i}{\hbar}M_z\varphi} = Ae^{\frac{i}{\hbar}M_z(\varphi+2\pi)} = Ae^{\frac{i}{\hbar}M_z\varphi} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}M_z \cdot 2\pi} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow e^{\frac{i}{\hbar}M_z \cdot 2\pi} = 1.$$

Поскольку  $\cos = 1$  при  $2\pi m$ ,  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \Rightarrow$

$$\frac{M_Z}{\hbar} \equiv m; M_Z = m\hbar.$$

Из условия нормировки  $\int \Psi^* \Psi dv = 1$  следует

$$\int_0^{2\pi} \Psi^* \Psi d\varphi = 1 \Rightarrow A^2 = \frac{\ell}{2\pi} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \Psi = \frac{\ell}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \equiv \frac{\ell}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{i}{\hbar} M_Z \varphi}.$$

**Задача 2.** Доказать, что оператор  $\hat{M}_Z$  эрмитов. Доказательство провести в а) полярной и б) декартовой системе координат.

**Решение.**

а) Докажем, что  $\hat{M}_Z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$  эрмитов.

$$\int \Psi_1^* \hat{M}_Z' \cdot \Psi_2 d\varphi = \int \Psi_1^* \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \Psi_2 d\varphi = -i\hbar \int \Psi_1^* \frac{\partial \Psi_2}{\partial \varphi} d\varphi =$$

$$= -i\hbar \int \Psi_1^* d\varphi \Big|_0^{2\pi} + \int \Psi_2 \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \Psi_1^* d\varphi \equiv -0 +$$

$$+ \int \Psi_2 \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \Psi_1^* d\varphi \equiv \int \Psi_2 \hat{M}_Z^* \Psi_1^* d\varphi.$$

Это прямое доказательство эрмитовости.

Знак минус при нуле следует из требования однозначности  $\Psi(\varphi) = \Psi(\varphi + 2\pi)$ .

б) Докажем для формы:  $M_Z = x\hat{P}_y - y\hat{P}_x$ .

$$\int \Psi_1^* \hat{M}_Z \cdot \Psi_2 dv = \int (\Psi_1^* x \hat{P}_y \Psi_2 - \Psi_1^* y \hat{P}_x \Psi_2) dv =$$

(операторы  $\hat{P}_y$  и  $\hat{P}_x$  эрмитовы)  $\Rightarrow$

$$\begin{aligned} &= \int x \Psi_1^* \hat{P}_y \Psi_2 dv - \int y \Psi_1^* \hat{P}_x \Psi_2 dv = \int x \Psi_2 \hat{P}_y \Psi_1^* dv - \\ &- \int y \Psi_2 \hat{P}_x \Psi_1^* dv = \int \Psi_2 (x \hat{P}_y - y \hat{P}_x) \Psi_1^* dv \equiv \int \Psi_2 \hat{L}_Z^* \Psi_1^* dv. \end{aligned}$$

**Задача 3.** Исходя из доказанной эрмитовости  $\hat{M}_x$ ,  $\hat{M}_y$ ,  $\hat{M}_z$  доказать эрмитовость  $\hat{M}^2$ .

**Решение.**

$$\int \Psi_1^* \hat{M}^2 \cdot \Psi_2 dv = \int \Psi_1^* (\hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2) \cdot \Psi_2 dv =$$

Мы ранее доказывали, что если операторы  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  эрмитовы и коммутируют, то  $\hat{A}\hat{B}$  - тоже эрмитов. Каждый оператор коммутирует сам с собой, следовательно, для эрмитова оператора  $\hat{A}$  оператор  $\hat{A}^2$  эрмитов. Отсюда следует, что операторы  $\hat{M}_x^2, \hat{M}_y^2, \hat{M}_z^2$  - эрмитовы.

$$= \int \Psi_2 \hat{M}_x^{2*} \Psi_1^* dv + \int \Psi_2 \hat{M}_y^{2*} \Psi_1^* dv + \int \Psi_2 \hat{M}_z^{2*} \Psi_1^* dv =$$

$$= \int \Psi_2 \hat{M}^{2*} \Psi_1^* dv \Rightarrow \text{эрмитовость.}$$

**Задача 4.** Проверить правила коммутации в равенствах

$$[x, \hat{M}_x] = 0; [y, \hat{M}_x] = -i\hbar z; [z, \hat{M}_x] = i\hbar y.$$

**Решение.**

$$1) [x, \hat{M}_x] = i\hbar x \left( z \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial z} \right) - i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial z} \right) \cdot x \equiv 0.$$

В данном выражении нет дифференциала по переменной  $x$ .

$$2) [y, \hat{M}_x] = yi\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial z} \right) - i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial z} \right) \cdot y =$$

$$= i\hbar \left( yz \frac{\partial}{\partial y} - y^2 \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial y}{\partial y} + y^2 \frac{\partial}{\partial z} - zy \frac{\partial}{\partial y} \right) = -i\hbar z.$$

$$3) [z, \hat{M}_x] = zi\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial z} \right) - i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial z} \right) \cdot z =$$

$$= i\hbar \left( z^2 \frac{\partial}{\partial y} - yz \frac{\partial}{\partial z} - z^2 \frac{\partial}{\partial y} + y + yz \frac{\partial}{\partial z} \right) = i\hbar y.$$

**Задача 5.** Доказать, что оператор кинетической энергии  $\hat{T}$  коммутирует с  $\hat{M}^2$ .

**Решение.**

Оператор  $\hat{T}$  представим в виде  $\hat{T} = \hat{T}_r + \frac{\hat{M}^2}{2mr}$ .  $\hat{T}_r$  не зависит от  $\theta$  и  $\varphi$ , следовательно, коммутирует с  $\hat{M}^2$ .

Оператор кинетической энергии трансверсального движения отличается от  $\hat{M}^2$  только на независящий от  $\theta$  и  $\varphi$  множитель  $\frac{1}{2mr}$ , а каждый оператор коммутирует сам с собой. Отсюда следует

$$[\hat{T}, \hat{M}^2] = [\hat{T}_r, \hat{M}^2] + \frac{1}{2mr} [\hat{M}^2, \hat{M}^2] \equiv 0.$$

**Задача 6.** Проверить правило коммутации

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

**Решение.**

$$\begin{aligned} [\hat{M}_x, \hat{M}_y] &= \hat{M}_x \hat{M}_y - \hat{M}_y \hat{M}_x = (y\hat{P}_z - z\hat{P}_y)(z\hat{P}_x - x\hat{P}_z) - \\ &- (z\hat{P}_x - x\hat{P}_z)(y\hat{P}_z - z\hat{P}_y) = y\hat{P}_z \cdot z\hat{P}_x - z^2\hat{P}_y\hat{P}_x - yx\hat{P}_x\hat{P}_z + \\ &+ zx\hat{P}_y\hat{P}_z - zy\hat{P}_x\hat{P}_z + yx\hat{P}_z\hat{P}_z + z^2\hat{P}_x\hat{P}_y - x\hat{P}_z \cdot z\hat{P}_y = y\hat{P}_z \cdot z\hat{P}_x - \\ &- x\hat{P}_z \cdot z\hat{P}_y + zx\hat{P}_y\hat{P}_z - zy\hat{P}_x\hat{P}_z = [z, \hat{P}_z](x\hat{P}_y - y\hat{P}_x) = -i\hbar \hat{M}_z \end{aligned}$$

## Практическое занятие № 4

**Задача 1.** Найти решение временного уравнения Шредингера для свободной частицы массы  $m$ , движущейся с импульсом  $p$  в положительном направлении  $x$ .

**Решение.**

Потенциальную энергию частицы можно считать равной нулю ( $U = 0$ ) и уравнение Шредингера будет иметь вид

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}.$$

Разделяем переменные:  $\Psi(x, t) = \Psi(x) \cdot f(t)$ .

$$\text{Имеем } i\hbar \frac{\partial(\Psi \cdot f)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2(\Psi \cdot f)}{\partial x^2} \Rightarrow$$

$$i\hbar \Psi \frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} f \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \Rightarrow$$

$$i\hbar \frac{f'}{f} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Psi''}{\Psi} \equiv E \Rightarrow$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -i \frac{E}{\hbar} f; \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \Psi = 0 \Rightarrow$$

$$f = c_1 e^{-i \frac{E}{\hbar} t} = c_1 e^{-i \omega t}; \quad \Psi = c_2 e^{ikx} + c_3 e^{-ikx} \Rightarrow$$

$$(k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E; c_3 = 0 \text{ в положительном направлении } x)$$

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

Полученное выражение соответствует плоской волне де Бройля.

$$\Psi^* \Psi = |\Psi|^2 = c \cdot c^* = \text{const.}$$

Местонахождение такой частицы равновероятно во всех точках пространства.

**Задача 2.** В некоторый момент времени частица находится в состоянии, описываемом - функцией, где  $A$  и  $a$  – неизвестные постоянные. Найти средние значения 1) координаты  $x$ ; 2) проекции импульса  $p_x$ .

**Решение.**

$$\begin{aligned} 1) \langle x \rangle &= \int x \cdot \Psi^* \Psi dx = A^* A \int_{-\infty}^{\infty} x \cdot e^{-\frac{x^2}{a^2}} \cdot e^{-ikx} \cdot e^{\frac{x^2}{a^2}} \cdot e^{ikx} dx = \\ &= A^* A \int_{-\infty}^{\infty} x \cdot e^{-\frac{2x^2}{a^2}} dx \equiv 0. \end{aligned}$$

Поскольку подынтегральная функция нечетная (из-за присутствия  $x$ ). Аналогично и для плоской Волны де Бройля.

$$2) \langle p_x \rangle = \int \Psi^* \hat{p}_x \Psi dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx =$$



$$\begin{aligned}
& \text{Вспользуемся заменой } \frac{\partial \Psi}{\partial x} = \left( ik - \frac{2x}{a^2} \right). \\
& = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} A^* A \cdot e^{-ikx - \frac{x^2}{a^2}} \cdot e^{ikx - \frac{x^2}{a^2}} \cdot \left( ik - \frac{2x}{a^2} \right) dx = \\
& = -i\hbar A^* A \int_{-\infty}^{\infty} \left( ik - \frac{2x}{a^2} \right) \cdot e^{-\frac{2x^2}{a^2}} dx = \hbar k A^* A \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{2x^2}{a^2}} dx + \\
& + \frac{2i\hbar A^* A}{a^2} \int_{-\infty}^{\infty} x \cdot e^{-\frac{2x^2}{a^2}} dx = \hbar k A^* A \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{2x^2}{a^2}} dx \equiv \\
& \equiv \hbar k \int \Psi^* \Psi dx = \hbar k \cdot 1 = \hbar k \Rightarrow \langle p_x \rangle = \hbar k.
\end{aligned}$$

**Задача 3.** Частица находится в сферическом симметричном поле в состоянии, описываемом нормированной волновой функцией

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \cdot \frac{e^{-r/a}}{r},$$

где  $r$  – расстояние от центра поля,  $a$  – постоянная. Найти  $\langle r \rangle$ .

**Решение.**

В данном случае  $dq \equiv dV$ . В качестве  $dV$  выбираем бесконечно тонкий сферический слой с радиусами  $r$  и  $r+dr$ . Для него  $dV = 4\pi r^2 dr$ . Отсюда следует

$$\langle r \rangle = \int r |\Psi|^2 \cdot 4\pi r^2 dr = \int_0^\infty \frac{e^{-2r/a}}{2\pi a r^2} \cdot 4\pi r^3 dr = \frac{2}{a} \int_0^\infty e^{-2r/a} r dr =$$

Введем переменную  $\frac{2r}{a} \equiv y \Rightarrow$

$$= \frac{a}{2} \int_0^\infty e^{-y} \cdot y dy = \frac{a}{2} \left( -y e^{-y} \Big|_0^\infty + \int_0^\infty e^{-y} dy \right) =$$

Используем тот факт, что  $y e^{-y} = 0$  при  $y = 0$  и  $y = \infty$ , в итоге получаем

$$= \frac{a}{2} \left( -e^{-y} \Big|_0^\infty \right) \cdot \frac{a}{2} = \frac{a}{2} \Rightarrow \langle r \rangle = \frac{a}{2}.$$

## Практическое занятие № 5

**Задача 1.** Найти среднюю кинетическую энергию частицы в одномерной потенциальной яме с глубиной  $U = \infty$  и шириной  $0 \leq x \leq \ell$ , если частица находится в состоянии  $\Psi(x) = A \cdot x \cdot (\ell - x)$ .

**Решение.**

Проведем нормировку волновой функции.

$$\int_0^\ell \Psi^* \Psi dx = A^2 \int_0^\ell x^2 (\ell - x)^2 dx = A^2 \int_0^\ell (x^2 \ell^2 - 2\ell x^3 + x^4) dx =$$

$$\begin{aligned}
&= A^2 \left( \ell^2 \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{5} - 2\ell \frac{x^4}{4} \right) \Big|_0^\ell = A^2 \left( \frac{\ell^5}{3} + \frac{\ell^5}{5} - 2\frac{\ell^5}{4} \right) = \\
&= A^2 \left( \frac{8\ell^5}{15} - \frac{\ell^5}{2} \right) = A^2 \left( \frac{16}{30} - \frac{15}{30} \right) \ell^5 = \frac{A^2 \ell^5}{30} \equiv 1 \Rightarrow \\
A^2 &= \frac{30}{\ell^5}.
\end{aligned}$$

Средняя кинетическая энергия

$$\begin{aligned}
\langle K \rangle &= \int_0^\ell \Psi \hat{K} \Psi dx = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\ell \Psi \frac{d^2 \Psi}{dx^2} dx; \\
\frac{d^2 \Psi}{dx^2} &= A \frac{\partial}{\partial x} [\ell - x + x(-1)] = A \frac{\partial}{\partial x} (\ell - 2x) = A \cdot (-2) = -2A; \\
\langle K \rangle &= \int_0^\ell -2A \cdot A \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right) x(\ell - x) dx = \frac{A^2 \hbar^2}{m} \cdot \left( \ell \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} \right) \Big|_0^\ell = \\
&= \frac{30 \hbar^2}{\ell^5 m} \left( \frac{\ell^3}{2} - \frac{\ell^3}{3} \right) = \frac{30 \hbar^2 \ell^3}{\ell^5 m \cdot 6} = \frac{5 \hbar^2}{m \ell^2}.
\end{aligned}$$

**Задача 2.** Из уравнений

$$\begin{cases}
A_1 e^{-\frac{k_2 d}{2}} = A_2 e^{-\frac{ik_1 d}{2}} + B_2 e^{\frac{ik_1 d}{2}}; \\
-k_2 A_1 e^{-\frac{k_2 d}{2}} = -ik_1 A_2 e^{-\frac{ik_1 d}{2}} + ik_1 B_2 e^{\frac{ik_1 d}{2}};
\end{cases}$$

показать, что  $\frac{A_2}{B_2} = e^{ik_1 d} \frac{ik_1 + k_2}{ik_1 - k_2}$ .

**Решение.**

$$A_1 = \left( A_2 e^{-\frac{ik_1 d}{2}} + B_2 e^{\frac{ik_1 d}{2}} \right) e^{\frac{k_2 d}{2}};$$

$$A_1 = \frac{ik_1}{k_2} e^{\frac{k_2 d}{2}} \left( A_2 e^{-\frac{ik_1 d}{2}} - B_2 e^{\frac{ik_1 d}{2}} \right) \Rightarrow$$

$$A_2 e^{-\frac{ik_1 d}{2}} + B_2 e^{\frac{ik_1 d}{2}} = \frac{ik_1}{k_2} \left( A_2 e^{-\frac{ik_1 d}{2}} - B_2 e^{\frac{ik_1 d}{2}} \right) \Rightarrow$$

$$A_2 \left( 1 - \frac{ik_1}{k_2} \right) e^{-\frac{ik_1 d}{2}} = -e^{\frac{ik_1 d}{2}} \left( 1 + \frac{ik_1}{k_2} \right) B_2 \Rightarrow$$

$$\frac{A_2}{B_2} = -e^{\frac{ik_1 d}{2}} \cdot e^{\frac{ik_1 d}{2}} \frac{1 + ik_1/k_2}{1 - ik_1/k_2} = e^{ik_1 d} \cdot \frac{k_2 + ik_1}{k_2} \frac{1 - ik_1/k_2}{1 - ik_1/k_2} =$$

$$= e^{ik_1 d} \cdot \frac{ik_1 + k_2}{ik_1 - k_2}.$$

**Задача 3.** Из системы уравнений

$$\begin{cases} B_3 e^{-\frac{k_2 d}{2}} = A_2 e^{\frac{ik_1 d}{2}} + B_2 e^{-\frac{ik_1 d}{2}}; \\ k_2 B_3 e^{-\frac{k_2 d}{2}} = -ik_1 A_2 e^{\frac{ik_1 d}{2}} + ik_1 B_2 e^{-\frac{ik_1 d}{2}}; \end{cases}$$

получить, что  $\frac{A_2}{B_2} = e^{-ik_1 d} \frac{ik_1 - k_2}{ik_1 + k_2}$ .

**Решение.**

$$A_2 e^{\frac{ik_1 d}{2}} + B_2 e^{-\frac{ik_1 d}{2}} = \frac{ik_1}{k_2} \left( B_2 e^{-\frac{ik_1 d}{2}} - A_2 e^{\frac{ik_1 d}{2}} \right) \Rightarrow$$

$$A_2 e^{ik_1 d} \left( 1 + \frac{ik_1}{k_2} \right) = B_2 e^{-\frac{ik_1 d}{2}} \left( \frac{ik_1}{k_2} - 1 \right) \Rightarrow$$

$$\frac{A_2}{B_2} = e^{-ik_1 d} \cdot \frac{ik_1 / k_2 - 1}{1 + ik_1 / k_2} = e^{-ik_1 d} \cdot \frac{ik_1 - k_2}{ik_1 + k_2}.$$

**Задача 4.** В одномерной прямоугольной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками ( $0 \leq x \leq b$ ) находится частица в состоянии  $\Psi(x) = A \cdot \sin^2\left(\frac{\pi x}{\ell}\right)$ . Определить вероятность пребывания частицы в основном состоянии.

**Решение.**

Найдем нормировочный коэффициент  $A$ .

$$\int \Psi^* \Psi dx = \int_0^{\ell} \Psi^2 dx = A^2 \int_0^{\ell} \sin^4 \frac{\pi x}{\ell} dx = A^2 \frac{\ell}{\pi} \int_0^{\ell} \sin^4 \frac{\pi x}{\ell} \cdot d \frac{\pi x}{\ell} =$$

$$= A^2 \frac{\ell}{\pi} \left( \frac{3 \pi x}{8 \ell} - \frac{\sin \frac{\pi x}{\ell}}{4} + \frac{\sin 4 \frac{\pi x}{\ell}}{32} \right) \Big|_0^\ell = A^2 \frac{\ell}{\pi} \cdot \frac{3 \pi \ell}{8 \ell} \equiv 1 \Rightarrow$$

$$A^2 = \frac{8}{3\ell}.$$

Собственная функция основного состояния ( $n = 1$ )

$$\Psi_1 = \sqrt{\frac{2}{\ell}} \sin \frac{\pi x}{\ell}.$$

Вероятность пребывания частицы в состоянии с  $n = 1$  будет  $\omega_1 = c_1^2$ , где  $c_1 = \int_0^\ell \Psi \Psi_1 dx = \sqrt{\frac{2}{\ell}} \cdot A \int_0^\ell \sin^3 \frac{\pi x}{\ell} dx =$

$$= \sqrt{\frac{2}{\ell} \frac{8}{3\ell}} \cdot \frac{\ell}{\pi} \int_0^\ell \sin^3 \frac{\pi x}{\ell} d\left(\frac{\pi}{\ell} x\right) = \frac{4}{\pi\sqrt{3}} \left( \frac{\cos^3(\pi x/\ell)}{3} - \cos \frac{\pi x}{\ell} \right) \Big|_0^\ell =$$

$$= \frac{4}{\pi\sqrt{3}} \left( \frac{\cos^3 \pi}{3} - \cos \pi - \frac{1}{3} \cos^3 0 + \cos 0 \right) =$$

$$= \frac{4}{\pi\sqrt{3}} \left( -\frac{1}{3} + 1 - \frac{1}{3} + 1 \right) = \frac{16}{3\pi\sqrt{3}} \Rightarrow$$

$$\omega_1 = c_1^2 = \left( \frac{16}{3\pi\sqrt{3}} \right)^2 = \frac{256}{27\pi^2} \approx 0,96.$$

## Практическое занятие № 6

**Задача 1.** Стационарный поток частиц с массой  $m$  и энергией  $E$  падает на абсолютно непроницаемую стенку  $U = \infty$  при  $x \leq 0$  и  $U = 0$  при  $x > 0$ . Найти распределение плотности вероятности (с точностью до нормировочного множителя). Определить координаты точек, где  $\omega(x)$  максимальна.

### Решение.

В соответствии с условием задачи построим схематический рис. 1.

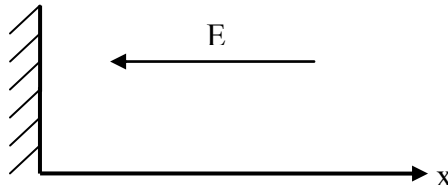


Рис. 1 [1]

Мы имеем непроницаемый барьер бесконечной высоты. Следовательно, при  $x = 0$   $\Psi(0) = 0$ .

В области  $x \leq 0$  частиц нет ( $\Psi \equiv 0$ ) по смыслу непреодолимого препятствия.

В области  $x > 0$  будем иметь  $\Psi = a \cdot e^{ikx} + b \cdot e^{-ikx}$ , где  $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ . Это суперпозиция падающей и отраженной волн.

Из граничного условия  $\Psi(0) = 0$  следует

$$\Psi(0) = a \cdot e^{ik \cdot 0} + b \cdot e^{-ik \cdot 0} = a + b = 0 \Rightarrow a = -b.$$

Тогда

$$\Psi = a(e^{ikx} - e^{-ikx}) = a(\cos kx + i \cdot \sin kx - \cos kx + i \cdot \sin kx) =$$

$$= 2i a \cdot \sin kx \Rightarrow$$

$$\omega(x) = \Psi \cdot \Psi^* = 2i a \cdot \sin kx \cdot (-2i a \cdot \sin kx) = 4a^2 \sin^2 kx$$

Необходимо определить максимумы  $\sin^2 kx$ .

**Задача 2.** Частица массы  $m$  падает слева на прямоугольный потенциальный порог высотой  $U_0$ . Энергия частицы равна  $E < U_0$ . Найти эффективную глубину проникновения  $x_{\text{эф}}$  частицы за порог, то есть расстояние, на которое плотность  $\omega$  убывает в  $e$  раз. Вычислить  $x_{\text{эф}}$  для электрона, если  $U_0 - E = 1,0$  эВ.

**Решение.**

Для решения задачи будем использовать рис. 2.

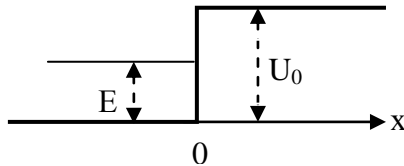


Рис. 2 [1]

Решение уравнения Шредингера в области  $x \geq 0$  есть

$$\Psi = a \cdot e^{k_2 x} + b \cdot e^{-k_2 x}, \text{ где } k = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}.$$



Из требования конечности  $\Psi$  - функции вытекает, что  $a = 0$ , следовательно  $\Psi = b \cdot e^{-k_2 x}$ . Тогда  $\omega(x) = \Psi^2 \sim e^{-k_2 x} \Rightarrow$

$$x_{\text{эф}} = \frac{1}{2k_2}.$$

При  $U_0 - E = 1 \text{ эВ} = 1,6 \cdot 10^{-14} \text{ Дж}$  получим

$$\begin{aligned} x_{\text{эф}} &= \frac{1}{2} \cdot \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U_0 - E)}} = \frac{1}{2} \cdot \frac{1,05 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}} = \\ &= \frac{1}{2} \cdot \frac{1,05 \cdot 10^{-9}}{\sqrt{18,2 \cdot 1,6}} = \frac{1}{2} \cdot \frac{1,05 \cdot 10^{-9}}{5,396} \approx 0,097 \cdot 10^{-9} \approx 0,1 \text{ нм}. \end{aligned}$$

**Задача 3.** В условиях предыдущей задачи показать, что при  $E < U_0$  коэффициент отражения  $R$  барьера равен единице.

**Решение.**

Запишем решения уравнения Шредингера.

$$x \leq 0: \Psi_1 = a_1 \cdot e^{ik_1 x} + b_1 \cdot e^{-ik_1 x}, k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar};$$

$$x \geq 0: \Psi_2 = a_2 \cdot e^{ik_2 x} + b_2 \cdot e^{-ik_2 x} \equiv b_2 \cdot e^{-ik_2 x}, k_2 = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}.$$

Делаем сшивки при  $x = 0$

$$\Psi_1^{(0)} = \Psi_2^{(0)} \Rightarrow a_1 + b_1 = b_2;$$

$$\left. \frac{d\Psi_1}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\Psi_2}{dx} \right|_{x=0} \Rightarrow ik_1 a_1 - ik_1 b_1 = -k_2 b_2 \Rightarrow$$

$$a_1 - b_1 = -\frac{k_2}{ik_1} b_2 = \frac{ik_2}{k_1} b_2.$$

Отсюда можем получить

$$a_1 = \frac{1}{2} b_2 \left( \frac{k_1 + ik_2}{k_1} \right); \quad b_1 = \frac{1}{2} b_2 \left( \frac{k_1 - ik_2}{k_1} \right) \Rightarrow$$

$$R = \left| \frac{b_1}{a_1} \right|^2 = \left| \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2} \right|^2 = \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2} \cdot \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2} = 1.$$

**Задача 4.** Частица массы  $m$  падает на прямоугольный потенциальный порог высотой  $U_0$ . Энергия частицы равна  $E > U_0$ . Найти  $R$  и  $D$ .

**Решение.**

Для решения задачи будем использовать рис. 3.

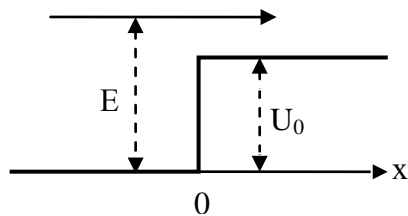


Рис. 3 [1]

Запишем решения уравнения Шредингера для двух областей.

$$x \leq 0: \Psi_1 = a_1 \cdot e^{ik_1x} + b_1 \cdot e^{-ik_1x}, k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar};$$

$$x \geq 0: \Psi_2 = a_2 \cdot e^{ik_2x}, k_2 = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar},$$

во второй области нет отраженной волны ( $b_2 = 0$ ).  
Из условий сшивки находим

$$\Psi_1^{(0)} = \Psi_2^{(0)} \Rightarrow a_1 + b_1 = a_2;$$

$$\left. \frac{d\Psi_1}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\Psi_2}{dx} \right|_{x=0} \Rightarrow ik_1(a_1 - b_1) = ik_2a_2 \Rightarrow$$

$$\left. \begin{array}{l} a_1 + b_1 = a_2; \\ \frac{k_1}{k_2}(a_1 - b_1) = a_2 \end{array} \right\} \Rightarrow a_1 + b_1 = \frac{k_1}{k_2}(a_1 - b_1) \Rightarrow$$

$$b_1 \left( 1 + \frac{k_1}{k_2} \right) = a_1 \left( \frac{k_1}{k_2} - 1 \right) \Rightarrow b_1 = a_1 \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \Rightarrow$$

$$\frac{b_1}{a_1} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \Rightarrow R = \left| \frac{b_1}{a_1} \right|^2 = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} \Rightarrow$$

$$D = 1 - R = \frac{(k_1 + k_2)^2 - (k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} =$$

$$= \frac{k_1^2 + k_2^2 + 2k_1k_2 - k_1^2 - k_2^2 + 2k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

**Задача 5.** Частица массы  $m$  падает на прямоугольную потенциальную яму шириной  $\ell$  и глубиной  $U_0$ . Энергия частицы вне ямы равна  $E$ . Найти  $\frac{a_3}{a_1}$ .

**Решение.**

Запишем решения уравнения Шредингера для трех областей

$$x < 0: \Psi_1 = a_1 \cdot e^{ik_1x} + b_1 \cdot e^{-ik_1x};$$

$$0 < x < \ell: \Psi_2 = a_2 \cdot e^{ik_2x} + b_2 \cdot e^{-ik_2x};$$

$$x > \ell: \Psi_3 = a_3 \cdot e^{ik_1x}.$$

Падающие волны  $\sim a_1 \cdot e^{ik_1x}$ , а в области  $x > \ell$  отраженной волны нет.

Из условий сшивки при  $x = 0$  и  $x = \ell$  имеем

$$\Psi_1^{(0)} = \Psi_2^{(0)}; \quad \Psi_2^{(0)} = \Psi_3^{(0)};$$

$\Rightarrow$

$$\frac{d\Psi_1}{dx} \Big|_{x=0} = \frac{d\Psi_2}{dx} \Big|_{x=0}; \quad \frac{d\Psi_2}{dx} \Big|_{x=\ell} = \frac{d\Psi_3}{dx} \Big|_{x=\ell}$$

$$1) \begin{cases} a_1 + b_1 = a_2 + b_2 \\ a_1 - b_1 = \frac{k_2}{k_1} (a_2 - b_2); \end{cases}$$

$$2) \begin{cases} a_2 \cdot e^{ik_2x} + b_2 \cdot e^{-ik_2x} = a_3 \cdot e^{ik_1x} \\ a_2 \cdot e^{ik_2x} - b_2 \cdot e^{-ik_2x} = \frac{k_1}{k_2} a_3 \cdot e^{ik_1x} \end{cases}$$

Из первой пары

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{1}{2} \left[ a_2 \left( 1 + \frac{k_2}{k_1} \right) + b_2 \left( 1 - \frac{k_2}{k_1} \right) \right] = \\ &= \frac{1}{2k_1} \left[ a_2 (k_1 + k_2) + b_2 (k_1 - k_2) \right]. \end{aligned}$$

Из второй пары

$$\begin{aligned} 2a_2 \cdot e^{ik_2\ell} &= a_3 \cdot e^{ik_1\ell} \left( 1 + \frac{k_1}{k_2} \right) \Rightarrow \\ a_3 &= \frac{2k_2 a_2 e^{ik_2\ell} \cdot e^{-ik_1\ell}}{k_1 + k_2}. \end{aligned}$$

Из второй пары

$$\begin{aligned} a_2 \cdot e^{ik_2\ell} + b_2 \cdot e^{-ik_2\ell} &= \frac{k_2}{k_1} a_2 \cdot e^{ik_2\ell} - b_2 \cdot e^{-ik_2\ell} \Rightarrow \\ a_2 \cdot e^{ik_2\ell} \left( 1 - \frac{k_2}{k_1} \right) &= -b_2 \cdot e^{-ik_2\ell} \left( 1 + \frac{k_2}{k_1} \right) \Rightarrow \\ a_2 \cdot e^{2ik_2\ell} \frac{k_2 - k_1}{k_2 + k_1} &= -b_2. \end{aligned}$$

Найдем теперь  $\frac{a_3}{a_1}$ :

$$\begin{aligned} \frac{a_3}{a_1} &= \frac{2k_2 a_2 e^{ik_2 \ell} \cdot e^{-ik_1 \ell}}{k_1 + k_2} = \\ &= \frac{1}{2k_1} \left[ a_2 \frac{k_1 + k_2}{k_2 + k_1} + -a_2 \cdot e^{2ik_2 \ell} \frac{(k_2 - k_1)^2}{k_2 + k_1} \right] = \\ &= \frac{4k_1 k_2 e^{ik_2 \ell} \cdot e^{-ik_1 \ell}}{k_1 + k_2 - (k_2 - k_1)^2 e^{2ik_2 \ell}} = \frac{4k_1 k_2 e^{-ik_1 \ell}}{k_1 + k_2 - e^{-ik_2 \ell} (k_2 - k_1)^2 e^{ik_2 \ell}}. \end{aligned}$$

## Практическое занятие № 7. Центральное поле

**Пример 1.** Электрон в атоме водорода находится в стационарном состоянии, описываемом волновой функцией  $\Psi(r) = A \cdot e^{-\alpha r}$ , где  $A$  и  $\alpha$  - некоторые постоянные. Найти энергию электрона  $E$  и постоянную  $\alpha$  (без определения  $A$ ).

**Решение.**

В соответствии с условием задачи будем использовать обозначение  $\Psi \equiv R$ .

Уравнение Шредингера для радиальной части  $R$  (без преобразования к  $\chi$ ) имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \Psi &= 0; \\ \frac{\partial \Psi}{\partial x} = A e^{-\alpha r} \cdot (-\alpha); \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} &= A \alpha^2 e^{-\alpha r} \quad \Rightarrow \end{aligned}$$

$$A\alpha^2 e^{-\alpha r} + (-\alpha) \frac{2}{r} \cdot A e^{-\alpha r} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \left( \frac{e^2}{r} \right) \right) \cdot A e^{-\alpha r} = 0 \Rightarrow$$

$$\alpha^2 + \frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{2\alpha}{r} + \frac{2me^2}{\hbar^2 r} = 0 \Rightarrow$$

$$\left( \alpha^2 + \frac{2mE}{\hbar^2} \right) - \left( 2\alpha - \frac{2me^2}{\hbar^2} \right) \cdot \frac{1}{r} = 0.$$

Это равенство выполняется при  $\forall r$ , если члены в каждой из двух скобок по отдельности равны нулю.

$$\Rightarrow E = -\frac{\alpha^2 \hbar^2}{2m}; \quad \alpha = \frac{me^2}{\hbar^2} \equiv \frac{1}{r_1},$$

где  $r_1$  - радиус первой орбиты Бора.

**Пример 2.** Частица массы  $m$  находится в сферически симметричной потенциальной яме, где  $U(r) = 0$  при  $r < r_0$ ,  $U = \infty$  при  $r = r_0$ , где  $r_0$  - радиус ямы. Найти возможные значения энергии и нормированные собственные функции частицы в  $s$  - состояниях ( $\ell = 0$ ), где  $\Psi$  - функция зависит только от  $r$ . Использовать представления  $R = \frac{\chi}{r}$ .

**Решение.**

Уравнение для  $\chi$  имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \chi(r)}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \cdot \ell(\ell+1)}{2mr^2} \chi(r) + U \cdot \chi(r) = E \cdot \chi(r).$$

Для  $s$  – состояний ( $\ell = 0$ ) получаем

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\chi}{dr^2} + (U-E)\chi = 0 \Rightarrow \begin{array}{l} \text{при } r < r_0 \\ (U=0) \end{array}$$

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \chi = 0; \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \Rightarrow$$

Получим уравнение  $\frac{d^2\chi}{dr^2} + k^2\chi = 0$  с условиями:

1)  $\Psi(r_0) = 0$  - бесконечная потенциальная яма  
 $\Psi \equiv R = \chi/r$  ;

2)  $\Psi = 0$  при  $r \rightarrow 0$  - требование конечности  $\Psi$  - функции.

Найдем решение в обычной форме

$$\chi = A \sin(kr + \alpha).$$

Из условия 2 получаем  $\alpha = 0$ .

$$\Psi = \frac{A \sin kr}{r}; \text{ из условия 1 получаем } kr_0 = n\pi. \text{ От-}$$

$$\text{сюда следует, что } k^2 = \frac{n^2 \pi^2}{r_0^2} \Rightarrow$$



$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{n^2 \pi^2}{r_0^2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mr_0^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

**Пример 3.** Нормировочный коэффициент  $A$  должен быть одинаков (по своему смыслу из формулы) для  $\forall n$ . Найдем его при  $n = 1$ .

**Решение.**

Для  $n = 1$   $k = \frac{\pi}{r_0}$  и из условия  $\int_0^{r_0} \Psi^2 \cdot 4\pi r^2 dr = 1$  получаем

$$\begin{aligned} A^2 \int_0^{r_0} \frac{\sin^2(\pi r / r_0)}{r^2} \cdot 4\pi r^2 dr &= 4\pi A^2 \int_0^{r_0} \sin^2 \frac{\pi r}{r_0} dr = \\ &= 4A^2 r_0 \int_0^{r_0} \sin^2 \left( \frac{\pi r}{r_0} \right) d \left( \frac{\pi r}{r_0} \right) = 4A^2 r_0 \left[ \frac{1}{2} \frac{\pi r}{r_0} - \frac{1}{4} \sin \left( \frac{2 \cdot \pi r}{r_0} \right) \right] \Big|_0^{r_0} = \\ &= 4A^2 r_0 \cdot \frac{1}{2} \pi \equiv 1 \Rightarrow 2\pi r_0 A^2 = 1 \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2\pi r_0}} \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi r_0}} \frac{\sin kr}{r}.$$

**Пример 4.** Частица массы  $m$  находится в сферически симметричной потенциальной яме, где  $U(r) = 0$  при  $r < r_0$ ,  $U = U_0$  при  $r \geq r_0$ . Найти уравнение, определяющее собственные значения энергии в  $s$  – состояниях при  $E < U_0$ .

**Решение.**

Для функции  $\chi$  уравнение Шредингера в областях 1 и 2 будет иметь вид:

$$1) r < r_0: \frac{d^2\chi_1}{dr^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\chi_1 = 0 \Rightarrow$$

$$\chi_1 = A \sin(k_1 r + \alpha); k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2};$$

$$2) r \geq r_0: \frac{d^2\chi_2}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)\chi_2 = 0 \Rightarrow$$

$$\chi_2 = B \cdot e^{k_2 r} + C \cdot e^{-k_2 r}; k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E).$$

Из требования конечности функций  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  вытекает, что:

$$1) \text{ при } r \rightarrow 0 \quad \alpha = 0;$$

$$2) \text{ при } r \rightarrow \infty \quad B = 0.$$

Отсюда следует

$$\Psi_1 = A \frac{\sin k_1 r}{r}; \quad \Psi_2 = C \frac{e^{-k_2 r}}{r}.$$

Проведем сшивку при  $r = r_0$ :

$$\Psi_1^{(r_0)} = \Psi_2^{(r_0)}; \left. \frac{d\Psi_1}{dr} \right|_{r=r_0} = \left. \frac{d\Psi_2}{dr} \right|_{r=r_0}.$$

$$1) A \frac{\sin k_1 r}{r_0} = C \frac{e^{-k_2 r_0}}{r_0} \Rightarrow A \sin k_1 r = C e^{-k_2 r_0};$$

$$2) \frac{d\Psi_1}{dr} = A \left( -\frac{1}{r^2} \sin k_1 r + \frac{1}{r} k_1 \cos k_1 r \right);$$

$$\frac{d\Psi_2}{dr} = -C e^{-k_2 r_0} \left( \frac{1}{r^2} + \frac{k_2}{r} \right) \Rightarrow$$

$$\frac{A}{r_0} \left( -\frac{1}{r_0} \sin k_1 r_0 + k_1 \cos k_1 r_0 \right) = -\frac{C e^{-k_2 r_0}}{r_0} \left[ \frac{1}{r_0} + k_2 \right];$$

$$C e^{-k_2 r_0} = A \sin k_1 r_0 \Rightarrow$$

$$-\frac{1}{r_0} \sin k_1 r_0 + k_1 \cos k_1 r_0 = -\frac{1}{r_0} \sin k_1 r_0 - k_2 \sin k_1 r_0 \Rightarrow$$

$$k_1 \cos k_1 r_0 = -k_2 \sin k_1 r_0 \Rightarrow$$

$$\operatorname{tg} k_1 r_0 = -\frac{k_1}{k_2}.$$

Примечание. Это уравнение типично для потенциальных ям конечной глубины, если в ходе решения не делать в том или ином месте переход к яме бесконечной глубины.

## Практическое занятие № 8. Спин и тождественные частицы

**Пример 1.** До открытия нейтронов предполагалось, что атомы состоят из протонов и электронов. Покажите, что в та-

ком случае атом азота (масса ядра которого примерно в 14 раз больше массы протона) был бы бозе - частицей.

Эксперимент же показал, что атом азота является ферми-частицей: «азотная катастрофа» - исторически первое свидетельство о возможности существования новой ядерной частицы с массой, близкой к протону, электрически нейтральной и имеющей спин  $1/2$ . Как понятие нейтрона решило эту проблему?

**Ответ.** До открытия нейтронов считали, что ядро атома состоит из протонов и электронов. Тогда ядро атома азота (заряд  $+7e$ , масса  $14 m_p$ ) – это 14 протонов и 7 электронов – 21 фермион. На атомных орбиталях еще 7 электронов. Всего 28. Результирующий спин – целочисленный: следовательно, этот атом является бозе-частицей.

Эксперимент показал, что он, в действительности, фермион. Имеем 7 электронов на орбитах, 7 протонов в ядре. Отсюда следует, что должно быть еще нечетное количество фермионов. Ядро по массе может включать еще 7 масс, близких к протонной. Допустим наличие еще 7 фермионов в ядре, каждый с массой  $\approx m_p$ , нулевым зарядом – гипотеза о нейтроне.

**Пример 2.** Допустим, что если спин электрона обусловлен вращением шарика с массой  $m_e$  и радиуса  $r_0$  (масса и классический радиус электрона). Оценить линейную скорость вращения «поверхности» электрона.  $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31}$  кг;  $r_0 = 10^{-15}$  м.

**Решение.**

Механический момент  $M = J\omega$ , где  $J = \frac{2}{5} m_e r_0^2$  - момент инерции,  $\omega$  – угловая частота. Искомая скорость  $v = \omega \cdot r_0$ , тогда

$$\begin{aligned} v &= \frac{M}{J} r_0 = \frac{\hbar/2}{\frac{2}{5} \cdot m_e r_0^2} r_0 = \frac{5\hbar}{4m_e r_0} = \frac{5 \cdot 1,05 \cdot 10^{-34}}{4 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 10^{-15}} = \\ &= \frac{5,25}{36,4} \cdot 10^{12} = 1,44 \cdot 10^{11}. \end{aligned}$$

$$\text{Размерность } \frac{\text{Дж} \cdot \text{с}}{\text{м} \cdot \text{кг}} = \frac{\text{Н} \cdot \text{м} \cdot \text{с}}{\text{м} \cdot \text{кг}} = \frac{\text{Н} \cdot \text{с}}{\text{кг}} = \frac{\text{кг} \cdot \text{м} \cdot \text{с}}{\text{с}^2 \cdot \text{кг}} = \frac{\text{м}}{\text{с}}.$$

Скорость света  $2,99 \cdot 10^8$  м/с.

**Пример 3.** Спин - орбитальное взаимодействие включает в себя воздействие на спиновый магнитный момент электрона магнитного поля, создаваемого протоном (атом водорода) в системе отсчета, связанной с электроном.

Оценить для основного состояния атома водорода дополнительную энергию  $\Delta E$ , возникающую при учете спин – орбитального взаимодействия.

**Решение.**

В системе электрона протон движется по круговой орбите радиуса  $r$  со скоростью  $v$ , создавая при этом магнитное поле  $H = ev/cr^2$ . В магнитном поле электрон приобретает дополнительную энергию  $\Delta E = - \vec{P}_{ms} \cdot \vec{H}$ , где  $\vec{P}_{ms}$  - спиновый магнитный момент электрона, который может быть ориентирован по полю  $H$  или против него.

Для оценки величин знак несущественен.  $\vec{P}_{ms}$  есть  $\mu_B = e\hbar/2m_e c$  - магнетон Бора. Тогда  $\Delta E = \mu_B \frac{ev}{cr^2}$ . Примем, что электрон находится на первом боровском радиусе

$r_a = \hbar^2 / m_e e^2$ , скорость на первой боровской орбите  $v_1 = e^2 / \hbar$ .  
Тогда

$$\begin{aligned} \Delta E &= \frac{e\hbar}{2m_e c} \cdot \frac{e \cdot (e^2 / \hbar)}{c \cdot (\hbar^4 / m_e^2 e^4)} = \left( \frac{e^2}{\hbar c} \right)^2 \cdot \frac{m_e e^4}{2\hbar^2} = \\ &= \alpha^2 \cdot RJ = \left( \frac{1}{137} \right)^2 \cdot 13,6 \text{ эВ} \approx 0,7 \cdot 10^{-3} \text{ эВ}. \end{aligned}$$

**Пример 4.** Найти собственные функции и собственные значения операторов  $\hat{\sigma}_x$  и  $\hat{\sigma}_y$ , где  $\hat{s}_x = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_x$  и  $\hat{s}_y = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_y$ ;

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ и } \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

**Решение.**

Собственные значения операторов  $\hat{s}_i$  и  $\hat{\sigma}_i$  отличаются только на  $\hbar/2$ .

Найдем собственные значения и функции именно для операторов  $\hat{\sigma}_x$  и  $\hat{\sigma}_y$ . Представим искомую функцию в виде

$\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ , тогда для первого оператора имеем

$$\hat{\sigma}_x \chi = \lambda \chi \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{aligned} b &= \lambda a \\ a &= \lambda b \end{aligned} \Rightarrow$$

$$b = \lambda^2 b \Rightarrow \lambda^2 = 1; \lambda = \pm 1.$$

Подставляя  $\lambda_1 = 1$ , получим  $a = b$  и собственную функцию  $\chi_1 = a \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ . Для  $\lambda_2 = -1$  имеем  $\chi_2 = a \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ .

Из нормировки получим

$$\chi_1^* \chi_1 = |a|^2 \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = (1+1)|a|^2 = 2|a|^2 = 1 \Rightarrow a = \frac{1}{\sqrt{2}e^{i\alpha_1}}$$

Пренебрегая фазовыми множителями получим

$$\lambda_1 = 1 \Rightarrow \chi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix};$$

$$\lambda_2 = -1 \Rightarrow \chi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Для второго оператора

$$\hat{\sigma}_y \chi = \lambda \chi \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{aligned} -ib &= \lambda a \\ ia &= \lambda b \end{aligned}$$

Из первого

$$i\lambda a = \lambda ia = b \Rightarrow b = \lambda ia = \lambda^2 b \Rightarrow \lambda^2 = 1; \lambda = \pm 1.$$

$$\text{Для } \lambda_1 = 1 \text{ получим } a = -ib \Rightarrow b = ia \Rightarrow \chi_1 = a \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix};$$

$$\text{для } \lambda_2 = -1 \text{ получим } b = -ia \Rightarrow \chi_2 = a \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}.$$

Из нормировки получим

$$\chi_1^* \chi_2 = |a|^2 \begin{pmatrix} 1 & -i \\ & i \end{pmatrix} = (1 + (-i)^2) |a|^2 = 2|a|^2 \Rightarrow a = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\lambda_1 = 1 \Rightarrow \chi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix};$$

$$\lambda_2 = -1 \Rightarrow \chi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}.$$

**Пример 5.** Доказать, что  $\hat{\sigma}_x \cdot \hat{\sigma}_y = i\hat{\sigma}_z$ ;  $\hat{\sigma}_y \cdot \hat{\sigma}_z = i\hat{\sigma}_x$ ;  
 $\hat{\sigma}_z \cdot \hat{\sigma}_x = i\hat{\sigma}_y$ .

**Решение.**

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

$$\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = i\hat{\sigma}_z;$$

$$\hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = i\hat{\sigma}_x;$$

$$\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = -1 \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} =$$



$$= i^2 \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = i \hat{\sigma}_y$$

**Пример 6.** Доказать, что  $\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2$ .

**Решение.**

$$\hat{\sigma}_x^2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix};$$

$$\hat{\sigma}_y^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix};$$

$$\hat{\sigma}_z^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

## 2. ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНЫХ ЗАНЯТИЙ

### Задача 1. Закон сохранения вероятности

Вероятностная интерпретация условия нормировки  $\int \Psi^* \Psi d^3x = 1$ , при которой выражение  $\Psi^* \Psi d^3x$  отождествляется с вероятностью обнаружить рассматриваемую частицу в элементе объема  $d^3x$ , с необходимостью приводит к закону сохранения.

Найдите этот закон и обсудите возможную интерпретацию полученного результата с точки зрения классических представлений.

#### Решение.

Искомый закон сохранения должен иметь вид уравнения непрерывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} s = 0,$$

где  $\rho = \Psi^* \Psi$  - плотность вероятности,  $s$  - плотность тока вероятности.

Поскольку  $\rho$  билинейная форма относительно  $\Psi^*$  и  $\Psi$ , уравнение непрерывности можно получить лишь в результате комбинации двух уравнений Шредингера

$$H\Psi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad H\Psi^* = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}$$

с одним и тем же гамильтонианом

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r)$$

в обоих случаях. Таким образом, получаем

$$\Psi^* H \Psi - \Psi H \Psi^* = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \rho}{\partial t}.$$

Согласно уравнению непрерывности левая часть этого соотношения должна записываться в виде дивергенции. Действительно,

$$\begin{aligned} \Psi^* H \Psi - \Psi H \Psi^* &= -\frac{\hbar^2}{2m} (\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^*) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \operatorname{div}(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*), \end{aligned}$$

поэтому можно для вектора  $s$  записать

$$s = \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*).$$

К классической интерпретации полученного результата можно прийти, рассуждая следующим образом. Если умножить обе величины  $\rho$  и  $s$  на массу частицы  $m$ , то в результате у нас получается плотность массы  $\rho_m$  и плотность импульса  $g$ :

$$\rho_m = m\rho, \quad g = ms,$$

тогда уравнение непрерывности естественно интерпретировать как закон сохранения массы. Точно так же, умножив

на заряд частицы  $e$ , придем к плотности заряда  $\rho_e$  и к плотности электрического тока  $\mathbf{j}$ :  $\rho_e = e\rho$ ,  $\mathbf{j} = e\mathbf{s}$ ,

а уравнение непрерывности станет законом сохранения заряда.

Примечательно, что закон сохранения массы и закон сохранения заряда по существу идентичны, так как оба они обусловлены конвекционным током одной и той же частицы.

Выражение для полного тока шредингерского поля, полученное из соотношений  $\mathbf{s} = \frac{\hbar}{2mi}(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*)$  и  $\rho_m = m\rho$ ,  $\mathbf{g} = m\mathbf{s}$ , будет иметь вид

$$\mathbf{p} = \int \mathbf{g} d^3x = \frac{\hbar}{2i} \int (\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*) d^3x,$$

с помощью интегрирования по частям второго слагаемого можно привести к виду

$$\mathbf{p} = \int \Psi^* \left( \frac{\hbar}{i} \nabla \right) \Psi d^3x,$$

что находится в согласии с определением (см. задачу 3) среднего значения оператора импульса  $\frac{\hbar}{i} \nabla$  в квантовом состоянии  $\Psi$ .

## **Задача 2. Классическая механика для пространственных средних**

Показать, что основное уравнение классической ньютоновской динамики

$$\frac{dp}{dt} = F,$$

где  $p$  – импульс,  $F$  – сила, действующая на частицу, для пространственных средних (математических ожиданий) имеет место и в квантовой механике.

### Решение.

Пусть сила  $F$  выражена через потенциал ( $V$ ), а импульс  $p$  заменен оператором  $\hbar/i \nabla$ . Интересующие нас средние определяются равенствами

$$p = \frac{\hbar}{i} \int \Psi^* \nabla \Psi d^3x,$$

$$F = - \int \Psi^* \nabla V \Psi d^3x.$$

Наша задача – показать, что данные интегралы удовлетворяют уравнению  $\frac{dp}{dt} = F$ , если функции  $\Psi^*$  и  $\Psi$  удовлетворяют уравнениям Шредингера

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi - V\Psi, \\ +\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi^* - V\Psi^*. \end{aligned}$$

Доказательство начнем с того, что продифференцируем равенство  $p = \frac{\hbar}{i} \int \Psi^* \nabla \Psi d^3x$  по времени:

$$p = \frac{\hbar}{i} \int (\Psi^* \nabla \Psi + \Psi \nabla \Psi^*) d^3x = \frac{\hbar}{i} \int (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) d^3x.$$

Выше мы учли, что вклад от поверхностного интеграла, появляющегося при интегрировании по частям второго слагаемого, равен нулю и его можно опустить. Избавляясь здесь от  $\Psi^*$  и  $\Psi$  с помощью данных выше уравнений Шредингера, получаем

$$p = -\frac{\hbar^2}{2m} \iint [(\nabla^2 \Psi^*)(\nabla \Psi) + (\nabla^2 \Psi)(\nabla \Psi^*)] d^3x + \int (\Psi^* \nabla \nabla \Psi + \nabla \Psi \nabla \Psi^*) d^3x.$$

Интегрирование по частям

$$\int (\nabla^2 \Psi^*)(\nabla \Psi) d^3x = - \int (\nabla \Psi^*)(\nabla^2 \Psi) d^3x$$

показывает, что оба слагаемых в первом интеграле взаимно сокращаются. Применяя далее интегрирование по частям к последнему из оставшихся слагаемому, получаем

$$p = \int \Psi^* \nabla \nabla \Psi - \nabla(\nabla \Psi) d^3x.$$

Воспользовавшись в заключение формулой

$$\nabla(\nabla \Psi) = \nabla \nabla \Psi + \Psi \nabla \nabla,$$

приходим к уравнению

$$p = - \int \Psi^* (\nabla \nabla) \Psi d^3x = F,$$

в справедливости которого требовалось убедиться.

### **Задача 3. Закон сохранения энергии**

Пусть энергия шредингеровского волнового поля описывается интегралом

$$E = \int \left[ \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla\Psi^*)(\nabla\Psi) + \Psi^* V(r)\Psi \right] d^3x.$$

В этом случае закон сохранения энергии должен иметь вид

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \operatorname{div} S = 0,$$

где  $W$  - плотность энергии,  $S$  – плотность потока энергии. Требуется вывести указанный закон сохранения, сконструировав подходящий вектор Умова-Пойнтинга  $S$ .

#### **Решение.**

Согласно выражению для энергии шредингеровского волнового поля

$$E = \int W d^3x,$$

где

$$W = \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla\Psi^*)(\nabla\Psi) + \Psi^* V\Psi.$$

Здесь первый член – плотность кинетической энергии, а второй – плотность потенциальной энергии. В соответствии с законом сохранения энергии нам нужна производная

$$\dot{W} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ (\nabla \dot{\Psi}^*) (\nabla \Psi) + (\nabla \Psi^*) (\nabla \dot{\Psi}) \right] + V (\dot{\Psi}^* \Psi + \Psi^* \dot{\Psi}).$$

Так как

$$(\nabla \dot{\Psi}^*) (\nabla \Psi) = \nabla (\dot{\Psi}^* \nabla \Psi) - \dot{\Psi}^* \nabla^2 \Psi;$$

$$(\nabla \Psi^*) (\nabla \dot{\Psi}) = \nabla (\dot{\Psi} \nabla \Psi^*) - \dot{\Psi} \nabla^2 \Psi^*,$$

то мы можем преобразовать часть выражения с производной, обусловленную кинетической энергией, и написать

$$\begin{aligned} \dot{W} = \nabla \left[ \frac{\hbar^2}{2m} (\dot{\Psi}^* \nabla \Psi) + (\dot{\Psi} \nabla \Psi^*) \right] - \frac{\hbar^2}{2m} \dot{\Psi}^* \nabla^2 \Psi - \\ - \frac{\hbar^2}{2m} \dot{\Psi} \nabla^2 \Psi^* + \dot{\Psi}^* \nabla \Psi + \dot{\Psi} \nabla \Psi^*. \end{aligned}$$

Уравнения Шредингера из предыдущей задачи позволяют нам в последних слагаемых заменить пространственные производные и потенциал производными по времени. Результирующие члены в точности сокращаются друг с другом:

$$\dot{\Psi}^* \left( -\frac{\hbar}{i} \dot{\Psi} \right) + \dot{\Psi} \left( \frac{\hbar}{i} \dot{\Psi}^* \right) = 0,$$



так что уравнение для  $\dot{W}$  действительно совпадает по форме с законом сохранения энергии, а искомый вектор Умова-Пойнтинга  $S$  равен

$$S = -\frac{\hbar^2}{2m} (\dot{\Psi}^* \nabla \Psi) + (\dot{\Psi} \nabla \Psi^*).$$

#### **Задача 4. Фундаментальные решения в случае свободного движения**

Решить одномерное волновое уравнение в случае  $V = 0$ . Обсудить физический смысл полученных решений.

**Решение.**

Волновое уравнение  $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t}$  допускает разделение переменных:

$$\Psi(x, t) = u(x)g(t),$$

так как при подстановке этого выражения в волновое уравнение получаем

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{u''}{u} = -\frac{\hbar}{i} \frac{g'}{g} = \hbar\omega,$$

Где через  $\hbar\omega$  обозначена постоянная разделения. Разбивая последнее выражение на два отдельных уравнения, находим

$$g' = -i\omega g, \text{ т.е. } g(t) = e^{-i\omega t};$$

$$u'' + \frac{2m\omega}{\hbar} u = 0.$$

Если  $\omega$  – действительная величина, то волновая функция будет периодической и квадрат модуля волновой функции будет зависеть от времени (стационарное состояние). Если  $\omega$  – положительная величина, то  $\frac{2m\omega}{\hbar} = k^2$  также положительная величина, поэтому решение  $u'' + \frac{2m\omega}{\hbar} u = 0$  будет, кроме того, периодической функцией пространственной переменной  $x$ .

Примечание. Физический смысл параметра  $\omega$  можно выяснить, рассматривая оператор в левой части уравнения  $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x}$  в качестве оператора Гамильтона, который в данном случае состоит из одного оператора кинетической энергии. Отсюда следует, что величина  $E = \hbar\omega$  представляет собой кинетическую энергию частицы и, таким образом, должна быть положительна, а наше решение есть собственная функция гамильтониана.

Так как  $k^2$  – положительная постоянная, общее решение уравнения  $u'' + \frac{2m\omega}{\hbar} u = 0$  или уравнения  $u'' + k^2 u = 0$  имеет вид

$$u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx},$$

поэтому одномерная волновая функция

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

состоит из двух волн, распространяющихся в противоположных направлениях. У обеих волн фазовая скорость равна  $v_{\phi} = \omega/k$ .

Физический смысл пространственной части волновой функции  $u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$  станет ясен, если записать в явном виде выражения для плотности и для потока:

$$\rho = \Psi^* \Psi; \quad s = \frac{\hbar}{2mi} \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right).$$

Согласно  $\Psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} + Be^{-i(kx + \omega t)}$  мы имеем

$$\rho = |A|^2 + |B|^2 + AB^* e^{2ikx} + A^* B e^{-2ikx},$$

$$s = \frac{\hbar k}{m} (|A|^2 - |B|^2).$$

Две волны с амплитудами  $A$  и  $B$  соответствуют, как видно, двум противоположно направленным потокам, интенсивность которых определяется относительными нормировочными постоянными волн и пропорциональна  $k$ . Выражение для плотности указывает на наличие интерференции двух (когерентных) волн, обуславливающей пространственную периодичность.

Когда нет особых причин (например, граничных условий) добиваться когерентности, разумно рассматривать каждую волну отдельно, полагая либо  $B = 0$ , что дает  $s > 0$ , либо  $A = 0$ , что дает  $s < 0$ . В результате получается прямолинейное движение частицы либо в том, либо в другом направлении. Считая, что величина  $k$  может быть обоих знаков, можно резюмировать наши результаты следующим образом:

$$\Psi(x, t) = Ce^{i(kx - \omega t)}, \quad E = \hbar\omega, \quad k^2 = \frac{2m\omega}{\hbar},$$

$$\rho = |C|^2, \quad s = \frac{\hbar k}{m} |C|^2.$$

Исключая  $\omega$ , находим  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ , поэтому импульс частицы и ее классическая скорость соответственно равны  $p = \hbar k, v = \frac{\hbar k}{m}$ .

Последняя совпадает отнюдь не с фазовой

$$v_\phi = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{1}{2} v,$$

а с групповой скоростью волны

$$v_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = v.$$

### Задача 5. Стоячие волны

Частица заключена между двумя непроницаемыми стенками, расположенными в точках  $x = -a$  и  $x = +a$ . (Стенки служат идеализацией сильного отталкивания, испытываемого частицей при приближении к указанным границам.)

Найти собственные состояния и обсудить их свойства.

### Решение.

Для стационарных состояний мы имеем

$$\Psi(x, t) = u(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}.$$

Пространственная часть волновой функции  $u(x)$  удовлетворяет уравнению Шредингера

$$u'' + k^2u = 0,$$

где  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ , и в самом общем случае имеет вид

$$u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}.$$

Наличие непроницаемых стенок налагает граничные условия

$$u(a) = 0, \quad u(-a) = 0,$$

Что в сочетании с условием нормировки  $\int_{-a}^a |u(x)|^2 dx = 1$ ,

позволяет полностью определить собственные функции.

Учитывая граничные условия, получаем для определения  $A$  и  $B$  систему двух линейных однородных уравнений:

$$Ae^{ika} + Be^{-ika} = 0, \quad Ae^{-ika} + Be^{ika} = 0.$$

Эта система допускает нетривиальное решение только в том случае, если ее определитель равен нулю:

$$\begin{vmatrix} e^{ika} & e^{-ika} \\ e^{-ika} & e^{ika} \end{vmatrix} = 0, \text{ или } \sin 2ka = 0.$$

Такому условию удовлетворяют лишь собственные значения  $k_n$ , определяемые формулой

$$k_n = \frac{\pi}{2a} n, \quad n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

Значение  $k = 0$  должно быть исключено, как противоречащее условию нормировки. Из соотношений  $k_n = \frac{\pi}{2a} n$  и  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$  для собственных значений энергии получаем

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} n^2.$$

На основании выражения имеем

$$e^{ik_n a} = e^{i \frac{\pi}{2} n} = i^n,$$

поэтому

$$B = (-1)^{n+1} A.$$

Если  $n$  – нечетное целое число, то  $B = A$ , а нормированные волновые функции равны

$$u_n^+(x) = a^{-\frac{1}{2}} \cos k_n x = a^{-\frac{1}{2}} \cos \frac{\pi n x}{2a}, \quad n = \pm 1, \pm 3, \dots$$

Если же  $n$  – четное целое число, то  $B = -A$ , и мы имеем

$$u_n^-(x) = a^{-\frac{1}{2}} \sin k_n x = a^{-\frac{1}{2}} \sin \frac{\pi n x}{2a}, \quad n = \pm 2, \pm 4, \dots$$

Так как функции  $u_n$  не зависят от знака  $n$ , то отрицательные значения  $n$  можно не принимать во внимание, поэтому, например, волновые функции четырех наименьших состояний будут равны:

$$n = 1, \quad E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}, \quad u_1^+ = a^{-\frac{1}{2}} \cos \frac{\pi x}{2a},$$

$$n = 2, \quad E_2 = 4E_1, \quad u_2^- = a^{-\frac{1}{2}} \sin \frac{\pi x}{a},$$

$$n = 3, \quad E_3 = 9E_1, \quad u_3^+ = a^{-\frac{1}{2}} \cos \frac{3\pi x}{2a},$$

$$n = 4, \quad E_4 = 16E_1, \quad u_4^- = a^{-\frac{1}{2}} \sin \frac{2\pi x}{a}.$$

Следует отметить, что собственные функции попеременно то четные ( $n$  нечетное), то нечетные ( $n$  четное) по отношению к инверсии с центром в начале координат. Об этом свойстве волновых функций говорят как о четности состояния: в случае симметричной функции мы говорим, что четность положительна, в противном случае – отрицательна. В принятых обозначениях ( $u_n^+$ ,  $u_n^-$ ) четность состояния отмечается верхними индексами «+» и «-».

Первые четыре собственные функции изображены на рис. 4.

Так как пространственные части собственных функций действительны, то результирующий ток вероятности не может существовать ни в одном состоянии. Это является следствием того, что в выражении  $u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$   $|A| = |B|$ . Волны с амплитудами  $A$  и  $B$  в данном выражении дают противоположные вклады в токи и импульсы.

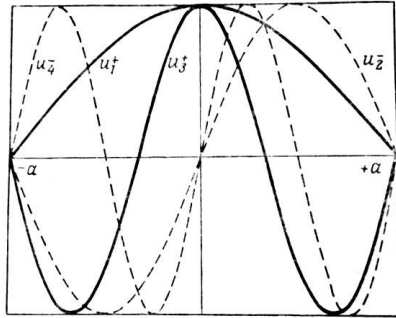


Рис. 4. Первые четыре собственные функции в одномерном потенциальном ящике с бесконечными стенками [1]

Следовательно, собственные функции гамильтониана, принадлежащие дискретным собственным значениям энергии, не являются собственными функциями оператора импульса

$$p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}.$$

Действительно, дифференцирование функций с четными и нечетными значениями  $n$  ведет не к воспроизведению, а к замене синусоидальных решений косинусоидальными. Среднее же значение импульса можно вычислить по формуле



$$\langle n|p|n\rangle = \frac{\hbar}{i} \int u_n(x) \frac{\partial}{\partial x} u_n(x) dx.$$

Для всех состояний этот интеграл исчезает, так как подынтегральное выражение является нечетной функцией  $x$ . Таким образом,  $\langle n|p|n\rangle = 0$  в согласии с обращением в нуль плотности тока вероятности.

### **Задача 6. Рассеяние на симметричном потенциальном барьере**

Поток частиц с энергией  $E$  падает на потенциальный барьер  $V(x)$ , ограниченный областью  $-a \leq x \leq a$ . Предполагается, что потенциал представляет собой четную функцию  $x$ :

$$V(x) = V(-x).$$

Требуется выразить амплитуды рассеяния вперед и назад через логарифмические производные волновой функции в точках  $x = \pm a$ .

#### **Решение.**

Из условия симметрии  $V(x) = V(-x)$  вытекает важное следствие: при любом значении энергии  $E$  уравнение Шредингера имеет как четное решение

$$u_+(x) = u_+(-x), \quad u'_+(x) = -u'_+(-x),$$

так и нечетное решение

$$u_-(x) = -u_-(-x), \quad u'_-(x) = u'_-(-x).$$

Эти решения, разумеется, линейно независимы, поэтому общее решение можно записать в виде их произвольной линейной комбинации. В интервале  $-a \leq x \leq a$  частные решения в крайнем случае можно определить с помощью численных методов, положив в точке  $x = 0$ :

$$u_+(0) = 1, \quad u'_+(0) = 0, \quad u_-(x) = 0, \quad u'_-(x) = 1.$$

Конечно, при этом нормировка базисных решений оказывается довольно произвольной. Таким образом, мы можем вычислить их логарифмические производные в точке  $x = a$ , которые для удобства запишем в безразмерном и не зависящем от их относительной нормировки виде

$$au'_+(a)/u_+(a) = L_+, \quad au'_-(a)/u_-(a) = L_-.$$

Логарифмические производные  $au'_\pm(-a)/u_\pm(-a)$  в точке  $x = -a$  будут равны  $-L_+$  и  $-L_-$ .

Решение, отвечающее падающей слева волне с единичной амплитудой, имеет вид

$$u(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Be^{-ikx}, & -\infty < x \leq -a, \\ C_1 u_+(x) + C_2 u_-(x), & -a \leq x \leq a, \\ (1+F)e^{ikx}, & a \leq x < \infty. \end{cases}$$

Требование непрерывности  $u(x)$  и  $u'(x)$  в точках  $x = \pm a$  дает четыре условия:

$$\begin{aligned}
e^{-ika} + Be^{ika} &= C_1 u_+(a) - C_2 u_-(a), \\
ik(e^{-ika} - Be^{ika}) &= -C_1 u'_+(a) + C_2 u'_-(a), \\
(1+F)e^{ika} &= C_1 u_+(a) + C_2 u_-(a), \\
ik(1+F)e^{ika} &= C_1 u'_+(a) + C_2 u'_-(a).
\end{aligned}$$

Складывая первое и третье выражения и вычитая из второго четвертое, получаем справа соответственно  $2C_1 u_+(a)$  и  $2C_1 u'_+(a)$ . Взяв теперь их отношение, находим

$$L_+ = ika \frac{-e^{-ika} + (1+F+B)e^{ika}}{e^{-ika} + (1+F+B)e^{ika}}.$$

Аналогичная процедура, но с переменной знаков, дает

$$L_- = ika \frac{e^{-ika} + (1+F-B)e^{ika}}{-e^{-ika} + (1+F-B)e^{ika}}.$$

Решая данные уравнения относительно  $(1+F \pm B)$  и полагая для простоты  $ka = q$ , окончательно получаем следующие выражения для амплитуд:

$$\begin{aligned}
B &= -\frac{1}{2} e^{-2iq} \left[ \frac{L_+ + iq}{L_+ - iq} + \frac{L_- + iq}{L_- - iq} \right], \\
1+F &= -\frac{1}{2} e^{-2iq} \left[ \frac{L_+ + iq}{L_+ - iq} - \frac{L_- + iq}{L_- - iq} \right].
\end{aligned}$$

На основании уравнения непрерывности следует ожидать, что сумма интенсивностей отраженной и прошедшей

волн будет равна интенсивности падающей волны. Действительно, из последних соотношений следуют формулы:

$$|B|^2 = \frac{(L_+L_- + q^2)^2}{(L_+L_- + q^2)^2 + q^2(L_+ - L_-)^2},$$

$$|1+F|^2 = \frac{q^2(L_+ - L_-)^2}{(L_+L_- + q^2)^2 + q^2(L_+ - L_-)^2},$$

так что ожидаемое равенство  $|B|^2 + |1+F|^2 = 1$  очевидно выполняется.

Таким образом, проблема нахождения амплитуд рассеяния вперед и назад свелась к отысканию логарифмических производных четной и нечетной волновых функций в точке  $x = a$ . Разумеется, эту последнюю задачу нельзя решить, пока потенциал  $V(x)$  не задан в явном виде.

Если  $q|L_+ - L_-| > |L_+L_- + q^2|$ , то преобладает рассеяние вперед, в противном случае – рассеяние назад.

### **Задача 7. Отражение от прямоугольного барьера**

Общую формулу, полученную в предыдущей задаче, применить к потенциальному барьеру вида

$$\frac{2m}{\hbar^2} V(x) = k_0^2, \quad |x| \leq a$$

И  $V = 0$  вне этого интервала. Вычислить коэффициент прохождения.

### Решение.

Внутри барьера уравнение Шредингера запишем в виде:

$$u'' + (k^2 - k_0^2)u = 0.$$

Оно имеет решение двух типов: для кинетической энергии ниже порога ( $k < k_0$ ) и для кинетической энергии выше порога.

Начнем с первого случая. Положим  $k_0^2 - k^2 = \chi^2$ , тогда  $u'' - \chi^2 u = 0$ .

Поэтому для четного и нечетного решений имеем соответственно

$$u_+(x) = \text{ch } \chi x, \quad u_+(0) = 1, \quad u'_+(0) = 0;$$

$$u_-(x) = \frac{1}{x} \text{sh } \chi x, \quad u_-(0) = 0, \quad u'_-(0) = 1.$$

Следовательно,

$$L_+ = au'_+(a) / u_+(a) = \chi a \text{th } \chi a,$$

$$L_- = au'_-(a) / u_-(a) = \chi a \text{cth } \chi a.$$

Для коэффициента прохождения с помощью формулы

$$|1 + F|^2 = \frac{q^2 (L_+ - L_-)^2}{(L_+ L_- + q^2)^2 + q^2 (L_+ - L_-)^2},$$

после элементарных преобразований получаем

$$T \equiv |1+F|^2 = \frac{1}{1 + \left(\frac{k_0^2}{2k\chi}\right)^2 \text{sh}^2 2\chi a}.$$

Коэффициент отражения находится с помощью формулы  $|B|^2 + |1+F|^2 = 1$ :  $R \equiv |B|^2 = 1 - T$ .

В классической механике падающий слева поток целиком отразился бы от барьера и мы имели бы  $|B|^2 = 1$  и  $|1+F|^2 = 0$ . Однако, согласно последней формуле для коэффициента прохождения, это возможно только в случае ( $\chi a \rightarrow \infty$ ), когда над энергетическим уровнем частицы возвышается огромная «потенциальная гора». Коэффициент прохождения становится при этом очень малым, хотя и конечным («туннельный эффект»), и приближенно его можно записать в виде

$$T = \frac{16k^2\chi^2}{k_0^4} e^{-4\chi a}.$$

Порядок величины коэффициента прохождения в основном определяется экспоненциальным множителем.

Когда кинетическая энергия частицы превышает высоту потенциального барьера, величина  $\chi$ , определенная соотношением  $k_0^2 - k^2 = \chi^2$ , становится мнимой. Вводя для удобства обозначение  $K^2 = k^2 - k_0^2 = -\chi^2$ , мы можем теперь записать

$$T = \frac{1}{1 + \left(\frac{k_0^2}{2kK}\right)^2 \text{sh}^2 2Ka}.$$

В классической механике при рассматриваемых энергиях должно было бы быть  $T = 1$  и  $R = 0$ , коэффициент же прохождения достигает максимального значения  $T = 1$  только при  $2Ka = n\pi$  ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ).

Между этими максимумами в точках  $2Ka = (n + \frac{1}{2})\pi$  находятся минимумы, которые лежат тем ближе к значению  $T = 1$ , чем меньше множитель при синусе, т.е. чем больше энергия частицы по отношению к высоте потенциального барьера.

Зависимость коэффициента прохождения  $T$  от отношения энергии к высоте барьера ( $U$ ) показана на рис. 5, где изображен график функции  $T(E/U)$  для случая  $2k_0a = 3\pi$ .

На рис. 6 иллюстрируется поведение волновой функции: на нем изображена зависимость плотности вероятности  $|u|^2$  от координаты  $x$ .

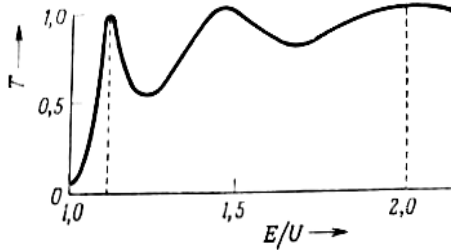


Рис. 5. Зависимость коэффициента прохождения  $T$  от отношения энергии к высоте барьера (при  $E > U$ ) [1]

На рис. 6 парой вертикальных линий отмечена ширина барьера  $a$ . Осцилляции слева от барьера обусловлены интерференцией между отраженной и падающей волнами.

По правую сторону от барьера  $|u|^2 = |1 + F|^2$ , то есть плотность вероятности постоянна, слева же от барьера имеет место интерференция между отраженной и падающей волнами.

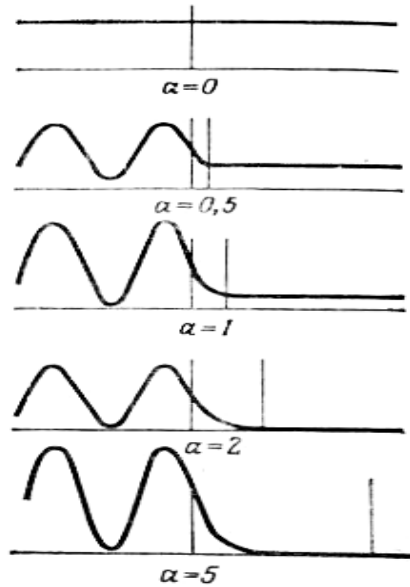


Рис. 6. Зависимость плотности вероятности  $|u|^2$  от координаты  $x$  для потока частиц, падающих слева на прямоугольный барьер в случае  $E < U$  [1]

Здесь показан случай  $k^2 = \chi^2 = \frac{1}{2}k_0^2$  для барьеров различной ширины. Чем шире барьер, тем меньше интенсивность прошедшей волны и тем ярче выражено явление интерференции.

### Задача 8. Периодический потенциал

Получить общие соотношения для волновых функций и энергетического спектра в случае периодического потенциала.



### Решение.

Если  $V(x)$  - периодическая функция с периодом  $a$ , то уравнение Шредингера инвариантно по отношению ко всем трансляциям, кратным  $a$ :

$$V(x+a) = V(x), \quad x \rightarrow x+na, \quad n=0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Обозначим через  $u_1(x)$  и  $u_2(x)$  два линейно независимых решения уравнения Шредингера, тогда функции  $u_1(x+a)$  и  $u_2(x+a)$  также должны быть решениями этого уравнения. Так как любое решение можно представить в виде линейной комбинации  $u_1(x)$  и  $u_2(x)$ , то это должно быть справедливо и в отношении решений  $u_1(x+a)$  и  $u_2(x+a)$ :

$$u_1(x+a) = C_{11}u_1(x) + C_{12}u_2(x),$$

$$u_2(x+a) = C_{21}u_1(x) + C_{22}u_2(x).$$

Теперь можно доказать (теорема Флоке), что среди этих решений имеются два, скажем  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$ , таких, что

$$\Psi(x+a) = \lambda\Psi(x),$$

Где множитель  $\lambda$  – постоянная. В этом случае

$$\Psi(x+na) = \lambda^n\Psi(x), \quad n=0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Искомое доказательство выглядит следующим образом:

$$\Psi(x) = Au_1(x) + Bu_2(x),$$

$$\Psi(x+a) = (AC_{11} + BC_{21})u_1(x) + (AC_{12} + BC_{22})u_2(x).$$

Последнее выражение равно  $\lambda\Psi(x)$ , если

$$AC_{11} + BC_{21} = \lambda A, \quad AC_{12} + BC_{22} = \lambda B.$$

Система двух однородных линейных уравнений относительно  $A$  и  $B$  имеет нетривиальное решение тогда и только тогда, когда обращается в нуль детерминант:

$$\begin{vmatrix} C_{11} - \lambda & C_{21} \\ C_{12} & C_{22} - \lambda \end{vmatrix} = 0.$$

Это уравнение – квадратное относительно  $\lambda$ , двум корням которого  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$ , соответствуют две функции  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$ .

Из формулы  $\Psi(x+na) = \lambda^n \cdot \Psi(x)$  можно усмотреть, что определитель Вронского  $D = \Psi_1\Psi_2' - \Psi_2\Psi_1'$  удовлетворяет соотношению  $D(x+a) = \lambda_1\lambda_2 D(x)$ .

По теореме Грина определитель Вронского  $D$  не зависит от  $x$ , отсюда следует, что  $\lambda_1\lambda_2 = 1$ . О параметрах  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  можно получить более подробные сведения, рассмотрев равенство  $\Psi(x+na) = \lambda^n \cdot \Psi(x)$ . Пусть  $|\lambda| > 1$ , тогда амплитуда волновой функции  $\Psi$  будет неограниченно возрастать при  $x \rightarrow \infty$  и неограниченно убывать при  $x \rightarrow -\infty$ .

Противоположный случай имеет место, если  $|\lambda| < 1$ . Такие решения не нормируемы даже в том смысле, который мы вкладываем в это понятие в случае плоских волн, поэтому фи-

зически значимые решения существуют лишь при  $|\lambda|=1$ , т.е. когда  $\lambda_1 = e^{iKa}$  и  $\lambda_2 = e^{-iKa}$ , а  $K$  – действительная величина.

Так как  $e^{2\pi in} = 1$ , то можно ограничиться теми значениями  $K$ , которые лежат в интервале  $-\frac{\pi}{a} \leq K \leq \frac{\pi}{2}$ , что даст нам полный набор всех допустимых волновых функций. Таким образом, для всех ограниченных решений  $\Psi(x)$  имеем

$$\Psi(x + na) = e^{2\pi in} \Psi(x).$$

Последнее возможно лишь в том случае, если  $\Psi(x) = e^{iKx} u_K(x)$ , а  $u_K(x)$  – периодическая функция, т.е.  $u_K(x) = u_K(x + a)$ .

Этот результат составляет содержание теоремы Блоха.

Обратимся теперь к вопросу об энергетическом спектре. В интервале  $0 \leq x \leq a$  построим решение  $\Psi$  из двух каких-либо решений  $u_1$  и  $u_2$  так же, как это сделано в формуле  $\Psi(x) = Au_1(x) + Bu_2(x)$ .

Для соседнего интервала периодичности  $0 \leq x \leq 2a$  в соответствии с формулой  $\Psi(x + na) = e^{2\pi in} \Psi(x)$  получаем

$$\Psi(x) = e^{iKa} [Au_1(x-a) + Bu_2(x-a)],$$

причем значения аргумента  $(x-a)$  попадают в предыдущий интервал. На границе этих интервалов, в точке  $(x = a)$ , должны совпадать как сами выражения  $\Psi(x) = Au_1(x) + Bu_2(x)$  и  $\Psi(x) = e^{iKa} [Au_1(x-a) + Bu_2(x-a)]$ , так и их производные:

$$\begin{aligned} Au_1(a) + Bu_2(a) &= e^{iKa} [Au_1(0) + Bu_2(0)], \\ Au'_1(a) + Bu'_2(a) &= e^{iKa} [Au'_1(0) + Bu'_2(0)]. \end{aligned}$$

Эта однородная относительно  $A$  и  $B$  система уравнений разрешима только в том случае, если обращается в нуль детерминант:

$$\begin{vmatrix} u_1(a) - e^{iKa}u_1(0) & u_2(a) - e^{iKa}u_2(0) \\ u'_1(a) - e^{iKa}u'_1(0) & u'_2(a) - e^{iKa}u'_2(0) \end{vmatrix} = 0.$$

Раскрывая детерминант, окончательно приходим к соотношению

$$\cos Ka = \frac{[u_1(0)u'_2(a) + u_1(a)u'_2(0)] - [u_2(0)u'_1(a) + u_2(a)u'_1(0)]}{2(u_1u'_2 - u_2u'_1)}.$$

Здесь в знаменателе стоит вронскиан, взятый для любого значения аргумента (так как вронскиан есть константа, то нет необходимости указывать его конкретное значение).

Данное уравнение представляет собой условие существования собственных значений. Оно разрешимо только в том случае, если абсолютная величина правой части не превышает единицы, тогда с помощью этого уравнения можно вычислить величину  $K$ .

Имеются целые интервалы значений энергии, удовлетворяющие указанному условию, и чередующиеся с ними интервалы значений энергии, для которых это условие не выполняется. Таким образом, энергетический спектр состоит не из отдельных уровней, а представляет собой чередующиеся последовательности разрешенных и запрещенных энергетических зон. Границы энергетических зон определяются из соотношения  $\cos Ka = \pm 1$ .

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключении укажем некоторые перспективы развития квантовых технологий. Чаще всего при упоминании квантовой механики у человека возникает лишь одна ассоциация – одно-временно живой и мертвый кот из знаменитого мысленного эксперимента Эрвина Шредингера. Однако квантовая механика со времен первой половины XX века прошла довольно большой путь. Появились перспективы не только теоретического, но и практического применения принципов квантовой механики, что может заметно повлиять на развитие технологий. Что такое квантовый компьютер? Как при помощи квантов можно закодировать информацию? Что на самом деле представляет из себя квантовая телепортация?

Физик Александр Львовский в программе «Перспективы» рассказывает о Российском Квантовом Центре, «Star Trek» и квантовой криптографии. "Заниматься квантовой оптикой очень важно, потому что свет является единственным физическим объектом, который может путешествовать, может летать. Свет – это идеальный медиум для коммуникаций, для передачи информации. Из чего бы ни были сделаны будущие квантовые компьютеры, они совершенно точно будут «разговаривать» друг с другом на языке света (фотонов). Поэтому, какая бы квантовая технология не использовалась для квантовых процессоров, нужно все равно развивать квантовую технологию света".

Физик Владимир Шалаев рассуждает о скорости обработки информации, нанофотонике и квантовой запутанности. "Если рассмотреть квантовые объекты, то окажется, что там работают законы не классической, а квантовой физики. Существует так называемая квантовая интерференция, квантовая запутанность – quantum entanglement. Это очень важно, потому что в этом случае у вас помимо 0 и 1 существуют ещё и все промежуточные состояния между 0 и 1. Квантовая запутан-

ность – это удивительное явление, которое позволяет вам обрабатывать гораздо большие массивы информации."

Физик Юджин Ползик говорит о передаче информации, о веществе, перепутанных состояниях и квантовом компьютере. "В чем проблема переноса вещества из одного места в другое? Первая — в том, что вещество не может передвигаться очень быстро, не говоря уже о скорости света. Трудно посылать материальные тела очень быстро. Поэтому самое простое — взять информацию о каком-то физическом теле и переслать ее по световому каналу, например, с помощью радиоволн сигналов или с помощью световых волн, с одного места на другое. Там эту информацию собрать и записать обратно на атомы, из которых состоял изначальный объект. Этот замечательный простой сценарий имеет одну проблему. Она заключается в том, что невозможно записать состояние квантовой частицы в виде обычных битов информации, в том виде, в котором обычно передается информация по интернету или по любым классическим видам связи. Связано это с тем, что, когда мы смотрим на квантовый объект, мы его изменяем".

Доктор физико-математических наук Сергей Кулик. "На самом деле квантовые технологии предлагают нам не только способ разрушения информационной структуры общества, но и способ защиты от хакерства. Существует такая технология, как квантовая криптография, идея которой заключается в том, что информация передается с помощью элементарных частиц света — фотонов. Другими словами, каждый бит переносится одним каким-то фотоном. И если появляется какой-то хакер, который попытается эти фотоны украсть или померить, какое у них состояние, и соответственно узнать передаваемое сообщение, то этот хакер эти фотоны неизбежно разрушит, потому что хакер большой, а фотоны маленькие. И таким образом он неизбежно будет замечен, и нарушение информационной безопасности удастся предотвратить".

"Квантовая обработка информации и квантовая связь (КОИКС) — новая, бурно развивающаяся область знаний, которая обладает огромным потенциалом, ведущим к прорыву во многих областях науки и техники. КОИКС использует принципиально новые методы вычисления и связи, базирующиеся на принципах квантовой механики, а не классической физики. Это сулит огромную вычислительную мощь, далеко выходящую за пределы возможностей любого классического компьютера, гарантирует абсолютно безопасную связь, а также стимулирует развитие зарождающихся квантовых технологий".

О перспективах квантовых технологий и их будущем применении говорит кандидат физико-математических наук Алексей Акимов. Квантовые технологии — это попытка ученых использовать необычные свойства частиц, чтобы создать полезное устройство. Некоторые знают, что сквозь стену пройти нельзя, но квантовые частицы об этом не знают, и они умеют проходить сквозь стены. Это явление называется туннелированием. К примеру, флэш-память. Внутри есть затвор, который ни к чему не подключен, и частицы проходят сквозь барьер. Это оказывается довольно полезным и эффективным. Этот пример побудил ученых более внимательно посмотреть на мир частиц и попытаться использовать все их необычные свойства. Другими необычными свойствами частиц являются перепутанные состояния, или состояния суперпозиции. Оказывается, если у вас есть какая-либо частица, которая может быть в каких-то конкретных состояниях, которые диктуются в квантовой механике, то она может быть и в промежуточных между ними состояниях. Это может быть использовано в такой теме, как квантовое вычисление. Что такое перепутанные состояния и как себе их представить? Возьмем, к примеру, телевизор. В телевизоре цвет составляется из трех базовых цветов: синего, красного и зеленого. В зависимости от того, в какой пропорции мы их сложим, наш глаз воспринимает разные цвета. По-

хожее дело происходит и в квантовой механике. Может быть два разных состояния, но они могут складываться с какими-то весами. Это не будет означать, что на самом деле эти веса излучаются каким-то источником, это означает, что если измерить данную частицу, то с вероятностью одного веса вы найдете ее в одном состоянии, а с вероятностью другого — в другом состоянии. Несмотря на то, что такой технический момент сильно отличается, смысл очень близкий. Это некоторые промежуточные состояния. Если у вас есть частица с двумя конкретными состояниями, но вы умеете делать ее в суперпозиции, то вы можете получить такое же богатство цветов, какое вам показывает телевизор.

Когда появились квантовые технологии? В 1985 году появилась флэш-память. Это была разработка корпорации Toshiba, у них есть исследовательское подразделение в Оксфордском университете. Само слово появилось в конце 90-х годов, его придумал автор Артур Экерт. И это было обобщение развития квантовых технологий, различных идей: квантовых вычислений, линий связи и других устройств. Флэш-память, например, не относится к квантовым компьютерам, но относится к квантовым технологиям. Квантовые технологии — это квантовая физика. Это попытка использовать квантовую физику на благо человечества. Квантовая физика — это очень богатая наука, и мы здесь выделяем тот класс явлений, который считаем полезней. Квантовая оптика — это наука, в которой мы учимся создавать состояние света. С одной стороны, мы по развитию интернета знаем, что самые быстрые линии, позволяющие нам работать в интернете, — это оптические линии. Это связано с тем, что у света высокая несущая частота порядка  $10^{15}$ , и мы его можем модулировать на очень высокой частоте. Если для электрического тока частоты порядка 1 ГГц дают вам гигабит, и это уже достаточно высокие частоты, то для света эти частоты являются совершенно несерьезными. Несложно и на терабите модулироваться, и на более высоких



частотах. С другой стороны, свет — это поток частиц. Свет состоит из фотонов. Фотоны — это частицы света. Их отличие от электронов в том, что они ни с чем не взаимодействуют. Электроны — это заряженные частицы. Атомы также состоят из заряженных частиц, поэтому электроны всегда очень хорошо взаимодействуют с атомами, тем более если они внутри твердого тела с кристаллической решеткой. Фотоны ни с кем не взаимодействуют. Они летят в свободном пространстве, и единственный объект, с которым они могут взаимодействовать, — это атом, который к ним резонансен. Во всех остальных случаях они являются идеальным переносчиком информации. Это одна из первых причин, почему они интересны для квантовых технологий — как переносчик информации, который с квантово-механической точностью сохраняет свои свойства, перенося информацию на большие расстояния.

Как и для чего это можно использовать? Это можно использовать сразу для нескольких вещей: для квантовых вычислений и для квантовых линий связи. Начнем с линий связи. Зачем нам нужны квантовые линии и почему бы не пользоваться обычным интернетом? Вопрос только в секретности. В современном интернете секретность обеспечивается криптографическими ключами, довольно большая часть базируется на технологиях открытого ключа. Это технология основана на том, что расшифровать ключ определенной длины сложно, имея современные вычислительные технологии, но если эти технологии улучшатся, то мы сможем этот ключ расшифровать, и тогда банковские переводы станут небезопасными. Квантовые линии связи предлагают другой принцип: они предлагают посылать информацию, закодированную в одиночных частицах, фотонах. В квантовой механике запрещена сама возможность копировать квантово-механические частицы. Вы их можете измерить только один раз. Если кто-то попытается ее измерить и послать такую же, то это можно будет сделать только с ошибкой, что сразу будет заметно.

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Флюгге З. Задачи по квантовой механике: в 2 т. / З. Флюгге; под ред. А.А. Соколова. – Череповец: Меркурий–ПРЕСС, 2000. – Т. 1. – 341 с.
2. Ландау Л.Д. Теоретическая физика: Учеб. пособие для вузов: в 10 т. Т. III: Квантовая механика (нерелятивистская теория)/ Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.. – М.: Физматлит., 2002. – 803 с.
3. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики/ Д.И. Блохинцев. М.: Высш. шк., 1982. - 664 с.
4. Ландау Л.Д. Квантовая механика /Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. - М.: Наука, 1985.
5. Иродов И.Е. Квантовая физика: Основные законы. учеб. пособие/ И.Е. Иродов. - М., 2001.
6. Ольховский И.И. Курс теоретической механики для физиков / И.И. Ольховский. - М.: Наука, 1970.
7. Ландау Л.Д. Механика /Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, М.: Наука, 1982.
8. Иродов И.Е. Сборник задач по атомной и ядерной физике / И.Е. Иродов. М., 1971.
9. Ландау Л.Д. Краткий курс теоретической физики / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. М., 1971.
10. Соколов А.А. Квантовая механика и атомная физика / А.А. Соколов, И.М. Тернов. М., 1970.
11. Сборник задач по теоретической физике /Л.Г. Гречко, В.И. Сугаков, О.Ф. Томасевич, А.М. Федорченко. М.: Высш. шк., 1984.
12. Вихман Э. Квантовая физика: пер. с англ./ Э. Вихман.- М.: Наука, 1977. Т IV, 414 с.
13. Давыдов А.С. Квантовая механика / А.С. Давыдов. – М.: Наука, 1973. – 704 с.

14. Галицкий В.М. Задачи по квантовой механике / В.М. Галицкий, Б.М. Карнаков, В.И. Коган. – М.: Наука, 1992. – 880 с.

15. Сборник задач по теоретической физике / Л.Г. Гречко [и др.] – М.: Высш. шк., 1984. – 319 с.

16. Левич В.Г. Курс теоретической физики: в 2-х т. В.Г. Левич, Ю.А. Вдовин, В.А. Мямлин. – М. : Наука, 1971. – Т. 2. – 936 с.

## ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение.....	3
1. Примеры решения задач для практических занятий.....	6
Практическое занятие № 1. Системы ортогональных функций	6
Практическое занятие № 2.....	11
Практическое занятие № 3.....	18
Практическое занятие № 4.....	23
Практическое занятие № 5.....	26
Практическое занятие № 6.....	31
Практическое занятие № 7. Центральное поле.....	38
Практическое занятие № 8. Спин и тождественные частицы..	43
2. Примеры решения задач для самостоятельных занятий.....	50
Задача 1. Закон сохранения вероятности.....	50
Задача 2. Классическая механика для пространственных сред-	
них.....	52
Задача 3. Закон сохранения энергии.....	55
Задача 4. Фундаментальные решения в случае свободного	
движения.....	57
Задача 5. Стоячие волны.....	60
Задача 6. Рассеяние на симметричном потенциальном барьере	65
Задача 7. Отражение от прямоугольного барьера.....	68
Задача 8. Периодический потенциал.....	72
Заключение.....	77
Библиографический список.....	82

**Учебное издание**

**Шушлебин Игорь Михайлович  
Янченко Лариса Ивановна**

**КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА  
В ЗАДАЧАХ И ВОПРОСАХ**

Подписано в печать 20.02.2018.

Формат 60x84/16. Бумага для множительных аппаратов.

Усл. печ. л. 5,1. Уч.-изд. л. 6,9. Тираж экз.

Зак. №

ФГБОУ ВО "Воронежский государственный технический  
университет"

394026 Воронеж, Московский просп., 14

Участок оперативной полиграфии издательства ВГТУ

394026 Воронеж, Московский просп., 14