Московский государственный технический университет
им. Н.Э. Баумана

Л.К.Мартинсон, Е.В.Смирнов

МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧ ПО КУРСУ ОБЩЕЙ ФИЗИКИ

РАЗДЕЛ “ИЗМЕРЕНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН В КВАНТОВЫХ СИСТЕМАХ”

Под редакцией Л.К. Мартинсона

Издательство МГТУ им. Н.Э. Баумана
2002

Рецензент: Д.В. Креопалов

Мартинсон Л.К., Смирнов Е.В. Методические указания к решению задач по курсу общей физики: Раздел "Измерение физических величин в квантовых системах"/Под ред. Л.К.Мартинсона. - М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э.Баумана, 2002, ____ с.

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

Для студентов II курса всех специальностей.

I. ПОСТУЛАТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Квантовая механика принципиально отличается от классической механики в подходе к вопросу о результатах измерения физических величин в квантовых системах.

Прежде всего, в квантовой механике физическая величина может иметь дискретный спектр значений, тогда как в классической механике все физические величины изменяются непрерывно.

Кроме того, результаты измерения в квантовой системе имеют вероятностный характер. Это означает, что в общем случае в процессе измерения наблюдаемой физической величины в квантовой системе с определенной вероятностью может реализоваться одно из нескольких возможных значений этой величины. Говорят, что в таком квантовом состоянии физическая величина не имеет определенного значения. В этом случае, зная волновую функцию, описывающую квантовое состояние, мы должны уметь предсказывать среднее значение наблюдаемой физической величины, полученное из ряда измерений.

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

Сформулируем основные постулаты квантовой механики:

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

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

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

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

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

Это уравнение имеет набор собственных функций Ψ_n и собственных значений f_n. В случае дискретного спектра физической величины этот набор представляет собой счетное множество (n=1, 2, ...).

Система собственных функций оператора любой физической величины представляет собой полную ортонормированную систему функций. Поэтому любую волновую функцию Ψ всегда можно разложить в ряд по таким собственным функциям:

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

причем коэффициенты этого разложения можно определить по формуле

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

Здесь интегрирование ведется по всей области R^N изменения пространственных переменных размерности N. При использовании декартовой системы координат в одномерных задачах dV=dx для N=1, в двумерных задачах dV=dxdy для N=2 и в трехмерных задачах dV=dxdydz для N=3.

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

$$P_n = \left| C_n \right|^2, \qquad (1.4)$$

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

$$< f > = \sum_n P_n f_n = \int_{R^N} \Psi^* \left(\hat{\Phi} \Psi \right) dV . \qquad (1.5)$$

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

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

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

II. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН ОПЕРАТОРАМИ

Приведем выражения для операторов основных физических величин квантовой механики:

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

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

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

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

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

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

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

или, используя оператор Лапласа,

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

Операторы проекций момента импульса. С использованием классической формулы для момента импульса материальной точки $\vec{L} = [\vec{r},\vec{p}]$, можно построить операторы проекций момента импульса по правилам

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$$
$$\hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) . \qquad (2.5)$$
$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

В сферической системе координат

$$\hat{L}_x = -i\hbar\left(\boldsymbol{sin}\,\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \boldsymbol{ctg}\,\theta\,\boldsymbol{cos}\,\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$
$$\hat{L}_y = -i\hbar\left(\boldsymbol{cos}\,\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \boldsymbol{ctg}\,\theta\,\boldsymbol{sin}\,\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \qquad (2.6)$$
$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

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

$L_z = m\hbar$, где m=0, ±1, ±2, ... (2.7)

каждому из которых соответствует собственная функция

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

Эти собственные функции ортонормированы, так что

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

Для оператора квадрата момента импульса

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

В сферической системе координат оператор Лапласа

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

может быть записан с выделением его радиальной части

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

и угловой части

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

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

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

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

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

причем каждому собственному значению с заданным значением l соответствуют $(2l + 1)$ собственных функций $\Psi_{lm}=Y_{lm}(\theta,\varphi)$, отличающихся значениями целочисленного параметра $m=0, \pm1, \pm2, \ldots, \pm l$. Каждому значению m соответствуют определенные значения проекции момента импульса L_z, которые определяются формулой (2.7).

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

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

Эти функции нормированы условием

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

<u>Операторы энергий.</u>

Оператор кинетической энергии определим, пользуясь классической формулой связи кинетической энергии частицы массы m_0 и ее квадрата импульса: $E_K = \frac{p^2}{2m_0}$. Аналогичное соотношение связывает операторы в квантовой механике. Поэтому, с учетом (2.4), получаем

$$\hat{E}_K = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta \qquad (2.13)$$

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

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

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

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

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

III. ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

<u>Задача 1.</u> Докажите, что оператор проекции импульса $\hat{p}_x$ является линейным самосопряженным (эрмитовым) оператором.

<u>Решение.</u> Линейность оператора $\hat{p}_x = -i\hbar \dfrac{\partial}{\partial x} \equiv \dfrac{\hbar}{i} \dfrac{\partial}{\partial x}$ очевидна, поскольку дифференцирование является линейной операцией. Покажем, что оператор $\hat{p}_x$ является эрмитовым оператором, то есть для него выполняется условие самосопряженности

$$\int_{R^N} \Psi_1^* \left(\hat{p}_x \Psi_2\right) \boldsymbol{d}V = \int_{R^N} \Psi_2 \left(\hat{p}_x \Psi_1\right)^* \boldsymbol{d}V . \qquad (3.1)$$

Здесь Ψ_1 и Ψ_2 - две произвольные функции, для которых выполнены все условия, накладываемые на волновые функции. В частности, эти функции должны обращаться в нуль вместе с производными на границе рассматриваемой области.

Для упрощения выкладок ограничиваемся рассмотрением одномерного случая, когда функции Ψ_1 и Ψ_2 зависят только от одной пространственной координаты *x*. Тогда имеем

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

Поскольку по условию $\Psi_1(\mp\infty) = \Psi_2(\mp\infty) = 0$, то

$$I = i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2 \frac{\partial \Psi_1^*}{\partial x} \boldsymbol{d}\,x = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2 \left(i\hbar \frac{\partial \Psi_1^*}{\partial x} \right) \boldsymbol{d}\,x =$$

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

Таким образом, показано выполнение условия самосопряженности

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* \left(\hat{p}_x \Psi_2\right) \boldsymbol{d}\,x\boldsymbol{.} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2 \left(\hat{p}_x \Psi_1\right)^* \boldsymbol{d}\,x$$

для оператора проекции импульса.

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

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

где n = 1, 2, ... - квантовое число, определяющее состояние частицы.

Определите: а) среднее значение координаты частицы $< x >$, б) среднее значение проекции импульса $< p_x >$ и в) среднее значение квадрата импульса частицы $< p^2 >$.

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

$$< x > = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^*(x)\{\hat{x}\,\Psi_n(x)\}\boldsymbol{d}\,x = \int_0^a \Psi_n(x)\cdot x\cdot\Psi_n(x)\boldsymbol{d}\,x.$$

Подставляя выражение для волновой функции частицы (3.2), получаем

$$< x > = \frac{2}{a}\int_0^a x\,\boldsymbol{sin}^2\frac{n\pi x}{a}\boldsymbol{d}\,x = \frac{1}{a}\int_0^a x\left(1 - \boldsymbol{cos}\frac{2n\pi x}{a}\right)\boldsymbol{d}\,x = \frac{a}{2}.$$

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

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

$$< p_x > = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^*(x)\{\hat{p}_x\Psi_n(x)\}\boldsymbol{d}\,x = \int_0^a \Psi_n(x)\left\{\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi_n}{\partial x}\right\}\boldsymbol{d}\,x =$$

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

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

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

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

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

$$< p^2 >= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^*(x)\{\hat{p}^2\Psi_n(x)\}\boldsymbol{d}\,x = -\frac{2\hbar^2}{a}\int_0^a \boldsymbol{sin}\frac{n\pi x}{a}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\boldsymbol{sin}\frac{n\pi x}{a}\right)\boldsymbol{d}\,x =$$
$$= \frac{2\hbar^2}{a}\cdot\frac{n^2\pi^2}{a^2}\int_0^a \boldsymbol{sin}^2\frac{n\pi x}{a}\boldsymbol{d}\,x = \frac{2\hbar^2}{a}\cdot\frac{n^2\pi^2}{a^2}\cdot\frac{a}{2}.$$

Таким образом, в состоянии частицы с квантовым числом n

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

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

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

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

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

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

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

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

<u>**Задача 3.**</u> Частица в некоторый момент времени находится в состоянии, описываемом волновой функцией, координатная часть которой имеет вид

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

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

<u>***Решение.***</u> Так как для волновой функции (3.3)

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

то по правилу (1.5) нахождения среднего значения имеем

$$\rangle p_x \langle = \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x)\{\hat{p}_x\Psi(x)\}\boldsymbol{d}\,x = k\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x)\Psi(x)\boldsymbol{d}\,x +$$

$$+\frac{2\hbar}{a^2}\int_{-\infty}^{+\infty}x\Psi^*(x)\Psi(x)\boldsymbol{d}\,x = k\hbar I_1 + \frac{2\hbar}{a^2}I_2.$$

Из условия нормировки волновой функции

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

Во втором интеграле подынтегральная функция является нечетной функцией координаты *x*, а интегрирование проводится в симметричных пределах от -∞ до +∞. Поэтому этот интеграл равен нулю, то есть

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

Поэтому, окончательно, находим отличное от нуля среднее значение проекции импульса частицы

$$< p_x >= k\hbar.$$

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

$$\Psi(x) = Ax\exp\left(-\frac{m\cdot\omega_0 x^2}{2\mathrm{h}}\right), \quad -\infty < x < +\infty. \qquad (3.4)$$

Здесь *A* - некоторая нормировочная постоянная, а *m* - масса частицы.

Решение. Так как потенциальная энергия осциллятора

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

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

$$< U >= \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x)\{\hat{U}\Psi(x)\}\boldsymbol{d}\,x = \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi(x)U(x)\Psi(x)\boldsymbol{d}\,x =$$

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

Интегрируя один раз по частям, получим

$$< U > = \frac{m\omega_0^2}{2} \frac{\hbar}{2m\omega_0} 3\int_{-\infty}^{+\infty} A^2 x^2 \boldsymbol{exp}\left(-\frac{m\omega_0 x^2}{\hbar}\right) \boldsymbol{d}\, x .$$

Так как по условию нормировки волновой функции

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

то для средней потенциальной энергии осциллятора получаем, окончательно, значение

$$< U > = \frac{3}{4}\hbar\omega_0 .$$

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

В квантовой механике полная энергия осциллятора определяется известной формулой

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

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

$$< U > = \frac{1}{2} E_1 = \frac{3}{4}\hbar\omega_0 .$$

<u>Задача 5.</u> В основном состоянии атома водорода волновая функция электрона имеет вид

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

где A - нормировочная константа, а r_1 - значение боровского радиуса. Найдите для этого состояния средние значения:

а) модуля кулоновской силы, действующей на электрон;

б) потенциальной энергии взаимодействия электрона с ядром;

в) кинетической энергии движущегося электрона.

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

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

Отсюда

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

Интегрируя по частям, находим

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

и вычисляем нормировочную константу

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

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

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

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

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

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

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

б) Потенциальная энергия электрона в поле ядра

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

а оператор потенциальной энергии $\hat{U}$ есть оператор умножения на функцию $U(r)$.

Поэтому

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

Здесь

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

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

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

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

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

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

$$<E_K>=\int_0^\infty \Psi^*(r)\{\hat{E}_K\Psi(r)\}4\pi r^2\,\boldsymbol{d}\,r=\frac{\hbar^2}{m_0 r_1}\int_0^\infty A^2\frac{1}{r}\,\boldsymbol{exp}\left(-\frac{2r}{r_1}\right)4\pi r^2\,\boldsymbol{d}\,r-$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0 r_1^2}\int_0^\infty A^2\,\boldsymbol{exp}\left(-\frac{2r}{r_1}\right)4\pi r^2\,\boldsymbol{d}\,r=\frac{\hbar^2}{m_0 r_1}I_1-\frac{\hbar^2}{2m_0 r_1^2}I_2\,\boldsymbol{.}$$

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

$$< E_K > = \frac{\hbar^2}{m_0 r_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_0 r_1^2} = \frac{\hbar^2}{2m_0 r_1^2}.$$

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

$$E_1 = -\frac{m_0 e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2}.$$

Если учесть, что боровский радиус

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

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

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

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

$$\Psi(\theta, \varphi) = A \sin\theta \cos\varphi, \tag{3.6}$$

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

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

Условие нормировки для волновой функции $\Psi(\theta,\varphi)$ имеет вид

$$\int\limits_0^{2\pi}\int\limits_0^{\pi}\Psi^*(\theta,\varphi)\Psi(\theta,\varphi)\sin\theta\,d\theta\,d\varphi=1.$$

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

$$A^2\int\limits_0^{2\pi}\cos^2\varphi\,d\varphi\int\limits_0^{\pi}\sin^3\theta\,d\theta=1.$$

Поскольку

$$\int\limits_0^{2\pi}\cos^2\varphi\,d\varphi=\pi, \qquad \text{а} \qquad \int\limits_0^{\pi}\sin^3\theta\,d\theta=\frac{4}{3},$$

то для константы *A* получаем значение $A=\sqrt{\dfrac{3}{4\pi}}$.

Используя формулу Эйлера, представим $\cos\varphi$ в комплексной форме

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Этот результат можно получить и формальным вычислением по формуле (1.15). Действительно

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

Поэтому

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

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

Так как второй интеграл в полученном соотношении равен нулю, то следовательно и $< L_z > = 0$.

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

$$\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = i\hbar \hat{L}_z . \qquad (3.7)$$

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

$$\left[\hat{L}_x,\hat{L}_y\right]=\hat{L}_x\hat{L}_y-\hat{L}_y\hat{L}_x$$

С учетом явного вида операторов (2.5) имеем

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

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

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

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

$$\left[\hat{L}_y,\hat{L}_z\right]=i\hbar\hat{L}_x; \qquad \left[\hat{L}_z,\hat{L}_x\right]=i\hbar\hat{L}_y.$$

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

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

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

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

Следовательно

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

Для первого слагаемого в (3.8) находим

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

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

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

С учетом этих соотношений

$$\left[\hat{L}_y^2,\hat{L}_x\right]=\hat{L}_y^2\hat{L}_x-\hat{L}_x\hat{L}_y^2=\hat{L}_y\hat{L}_y\hat{L}_x-\hat{L}_y\hat{L}_x\hat{L}_y+\hat{L}_y\hat{L}_x\hat{L}_y-\hat{L}_x\hat{L}_y\hat{L}_y=$$
$$=\hat{L}_y\left[\hat{L}_y,\hat{L}_x\right]+\left[\hat{L}_y,\hat{L}_x\right]\hat{L}_y=-i\hbar\left(\hat{L}_y\hat{L}_z+\hat{L}_z\hat{L}_y\right),$$
$$\left[\hat{L}_z^2,\hat{L}_x\right]=\hat{L}_z^2\hat{L}_x-\hat{L}_x\hat{L}_z^2=\hat{L}_z\hat{L}_z\hat{L}_x-\hat{L}_z\hat{L}_x\hat{L}_z+\hat{L}_z\hat{L}_x\hat{L}_z-\hat{L}_x\hat{L}_z\hat{L}_z=$$
$$=\hat{L}_z\left[\hat{L}_z,\hat{L}_x\right]+\left[\hat{L}_z,\hat{L}_x\right]\hat{L}_z=i\hbar\left(\hat{L}_z\hat{L}_y+\hat{L}_y\hat{L}_z\right).$$

Подставляя полученные выражения в (3.8), получаем

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

то есть оператор $\hat{L}^2$ коммутирует с оператором $\hat{L}_x$.

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

Вывод: квадрат момента импульса может быть одновременно точно измерен только с одной из его проекций.

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

<u>***Решение.***</u> В сферической системе координат

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

Поэтому

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

В этом выражении коммутатор $\left[\Delta_{\vartheta,\varphi},\Delta_{\vartheta,\varphi}\right]=\Delta^2_{\vartheta,\varphi}-\Delta^2_{\vartheta,\varphi}=0$.

Также равен нулю и коммутатор $\left[\Delta_r,\Delta_{\vartheta,\varphi}\right]=\Delta_r\Delta_{\varsigma,\varphi}-\Delta_{\theta,\varphi}\Delta_r=0$, так как операторы Δ_r и $\Delta_{\theta,\varphi}$ содержат дифференциальные операции по разным переменным, и результат их последовательного действия на волновую функцию не зависит от порядка их следования. Тем самым мы доказали, что $\left[\hat{p}^2,\hat{L}^2\right]=0$.

Равенство нулю этого коммутатора означает, что квадрат импульса и квадрат момента импульса могут быть измерены одновременно точно.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

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

ОГЛАВЛЕНИЕ