Учебно пособие
задачи по квантова механика

гл. ас. Петко Митев, кат. „Теоретична физика”, ПУ

Тема: Вълнови свойства на микрочастици. Вълни на дьо Бройл. Вълнов пакет. Групова скорост

Теоретичен минимум: С движението на свободна нерелативистка частица с маса m, импулс $\vec{p}$ и енергия $E=\dfrac{\vec{p}^{\,2}}{2m}$ **Луи дьо Бройл** свързва плоска вълна (*вълна на дьо Бройл*)

(Ф.1) $$\Psi_{\vec{p}}(\vec{r},t)=A(\vec{p}).e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}.\vec{r}-E.t)}.$$

Съгласно вълновата интерпретация за всяка микрочастица са в сила представянията за импулса $\vec{p}=\hbar.\vec{k}$ и енергията $E=\hbar.\omega$. Тогава:

(Ф.2) $$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r},t)=A(\vec{k}).e^{i(\vec{k}.\vec{r}-\omega.t)},$$

където:

- ω - **кръгова честота** на ЕМ-вълна, като $\omega=\dfrac{E}{\hbar}=\dfrac{\vec{p}^{\,2}}{2m\hbar}$;
- $\vec{k}$ - **вълнов вектор**, като $\vec{k}=\dfrac{\vec{p}}{\hbar}$.

В едномерен случай равенство (Ф.2) има вида

(Ф.2$'$) $$\Psi_{\vec{k}}(x,t)=A(k).e^{i(k.x-\omega.t)}.$$

Величината $\varphi=k.x-\omega.t$ се нарича **фаза на вълната**. Геометричното място от точки с еднаква фаза, се нарича **фазова повърхност**, имаща уравнение

(Ф.3) $$k.x-\omega.t=const, \qquad a.x+b.y=const$$

което всъщност се явява уравнение на равнина (*фазова повърхнина*). За да получим скоростта на движение на фазовата повърхност, диференцираме (Ф.3):

$$k.dx-\omega.dt=0, \quad \text{т.е.} \quad k.dx=\omega.dt,$$

откъдето за **фазовата скорост** получаваме формулата

(Ф.4) $$v_f=\frac{dx}{dt}=\frac{\omega}{k}.$$

Фазова скорост е скоростта, с която се движи фазовата повърхност по посоката на разпространение на вълната. Ако фазовата скорост е **функция на вълновия вектор** (*респективно на* ***дължината на вълната***), т.е. ако $v_f=g(\vec{k})=\tilde{g}(\lambda)$, то тези вълни притежават **дисперсия**. За тяхното адекватно описание е необходимо да се знае **груповата скорост**

(Ф.5) $$v_g=\frac{d\omega}{dk}.$$

<u>Определение</u>: суперпозицията от вълни на Дьо Бройл, която е различна от нула в **<u>ограничена</u>** <u>пространствена област</u>, се нарича **вълнов пакет**.

Вълновият пакет може да бъде представен като суперпозиция от плоски вълни на Дьо Бройл посредством безкрайната сума (*интеграл*)

$$\Psi(\vec{r},t)=\int_{\Re_k^3} A(\vec{k}).e^{i(\vec{k}.\vec{r}-\omega.t)}d^3\vec{k}, \tag{Ф.6}$$

където $d^3\vec{k}=dk_x dk_y dk_z$ е елементарен обем в пространството на вълновия вектор $\vec{k}$. Ако положим $\vec{p}=\hbar\vec{k}$, т.е. $\vec{k}=\dfrac{\vec{p}}{\hbar}$, то $\Rightarrow$ $d^3\vec{k}=\dfrac{1}{\hbar^3}d^3\vec{p}$, следователно вълновият пакет ще се представи във вида

$$\Psi(\vec{r},t)=\frac{1}{\hbar^3}\int_{\Re_p^3} A(\vec{p}).e^{\frac{1}{\hbar}(\vec{p}.\vec{r}-E.t)}d^3\vec{p}. \tag{Ф.7}$$

Задача ❶: Да се установи дали вълните на Дьо Бройл във вакуум притежават дисперсия?

Решение: Понеже $\omega=\dfrac{E}{\hbar}$, $E=\dfrac{p^2}{2m}$ и $k=\dfrac{p}{h}$, то фазовата скорост ще бъде равна на

$$v_f=\frac{\omega}{k}=\left(\frac{E}{\hbar}\right).\left(\frac{\hbar}{p}\right)=\frac{E}{p}=\left(\frac{p^2}{2m}\right).\frac{1}{p}=\frac{p}{2m}=\frac{mv}{2m}\equiv\frac{v}{2},$$

където v е скоростта на микрочастицата. Оказва се, че фазовата скорост на вълната на Дьо Бройл е два пъти по-малка от скоростта на микрочастицата. Фазовата скорост може да се запише още като

$$v_f=\frac{p}{2m}=\frac{\hbar k}{2m}\equiv g(k),$$

откъдето следва, че вълните на Дьо Бройл **притежават дисперсия**.

Задача ❷: Да се определи **груповата скорост** на вълната на Дьо Бройл за:

а) нерелативистка частица с енергия $E=\dfrac{\vec{p}^2}{2m}$, движеща се със скорост $v<<c$;

б) релативистка частица с енергия $E=\sqrt{p^2c^2+m_0^2c^4}$, движеща се със скорост $v\le c$.

Решение:

(а) $v_g=\dfrac{d\omega}{d\vec{k}}$, $\vec{p}=\hbar\vec{k}$, $E=\hbar.\omega$, следователно

$$\omega=\frac{E}{\hbar}=\left(\frac{\vec{p}^2}{2m_0}\right)\frac{1}{\hbar}=\frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m_0\hbar}=\frac{\hbar}{2m_0}\vec{k}^2, \quad \text{и} \quad \text{тогава} \quad \vec{v}_g=\frac{d\omega}{d\vec{k}}=\frac{2\hbar\vec{k}}{2m_0}=\frac{\hbar\vec{k}}{m_0}=\frac{\vec{p}}{m_0}=\vec{v}.$$

Оказва се, че в нерелативисткия случай груповата скорост съвпада със скоростта на частицата.

(б) $$\omega=\frac{E}{\hbar}=\frac{\sqrt{p^2c^2+m_0^2c^4}}{\hbar}=\frac{\sqrt{\hbar^2\vec{k}^2c^2+m_0^2c^4}}{\hbar},$$

следователно груповата скорост

$$\vec{v}_g = \frac{d\omega}{d\vec{k}} = \frac{1}{\hbar}\frac{1}{2}\left(\hbar^2\vec{k}^2c^2 + m_0^2c^4\right)^{\frac{1}{2}-1}.2\hbar^2\, c^2\,\vec{k} = \frac{c^2\hbar\vec{k}}{\sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4}} = \frac{c^2\vec{p}}{\sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4}} =$$

$$= \frac{\vec{p}c^2}{E} = \frac{(m\vec{v})c^2}{E} = \frac{(mc^2)\vec{v}}{E} = \frac{E\,\vec{v}}{E} = \vec{v}\,.$$

Оказва се, че и в релативисткия случай груповата скорост $\vec{v}_g$ съвпада със скоростта $\vec{v}$ на частицата.

Задача ❸: Да се докаже, че вълната:

$$\varphi(x) = \begin{cases} e^{ik_0x}, & |x| \le \dfrac{l}{2} \\ 0\quad, & |x| > \dfrac{l}{2} \end{cases}$$

при **крайни** стойности на l, **не е монохроматична.** Да се намери интервалът от вълнови числа $\Delta k = k - k_0$, в който могат да се считат различни от нула амплитудите на отделните плоски вълни, от суперпозицията на които се получава вълната $\varphi(x)$.

Решение:

Представяме функцията $\varphi(x)$ **чрез <u>интеграл на Фурие</u>**:

(1) $\quad \varphi(x) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} A(k)\, e^{ikx} dk\,,$

където коефициентите в редовото развитие се дават с

$$A(k) = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\varphi(x)\, e^{-ikx}dx\,.$$

Но тъй като при $|x| \le \dfrac{l}{2}$ функцията е $\varphi(x) = e^{ik_0x}$, то ще имаме

$$A(k) = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{ik_0x}.\, e^{-ikx}dx = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{i(k_0-k)x}dx = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{i.\Delta k.x}dx = \frac{1}{2\pi(i.\Delta k)}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{i.\Delta k.x}d(i.\Delta k)\,x =$$

$$= \frac{1}{2\pi(i.\Delta k)}\, e^{i.\Delta k.x}\Bigg|_{x=-l/2}^{x=l/2} = \frac{1}{\pi.\Delta k}\,\frac{e^{i.\Delta k.\frac{l}{2}} - e^{-i.\Delta k.\frac{i}{2}}}{2.i} = \frac{1}{\pi.\Delta k}\sin\,(\Delta k.\frac{l}{2}) =$$

$$= \frac{1}{\pi.\Delta k}\sin\,(\Delta k.\frac{l}{2}).\frac{(\Delta k.\frac{l}{2})}{(\Delta k.\frac{l}{2})} = \frac{l}{2\pi}\,\frac{\sin\,(\Delta k.\frac{l}{2})}{(\Delta k.\frac{l}{2})} = \frac{l}{2\pi}\,\frac{\sin u}{u}\,,\ \text{където}\ u = \Delta k.\frac{l}{2}\,.$$

И така, получихме, че амплитудните коефициенти в представянето на функцията $\varphi(x)$ чрез интеграл на Фурие са $A(u) = \dfrac{l}{2\pi}\,\dfrac{\sin u}{u}$.

Каква е максималната стойност $A_{\max}(u) = ?$ на тези коефициенти. За да я определим, диференцираме $A(u)$ по u:

$A^{/}(u) = \dfrac{l}{2\pi}\dfrac{(u.\cos u - \sin u)}{u^2}$ и $A^{/}(u) = 0 \Leftrightarrow (u.\cos u - \sin u) = 0$, а това е изпълнено при $u = 0$, т.е. $\Delta k = 0 \Leftrightarrow \boxed{k = k_0}$.

Тогава очевидно $A_{\max}(u) \equiv A(k_0) = \dfrac{l}{2\pi}\lim\limits_{k \to k_0}\dfrac{\sin(\Delta k.\frac{l}{2})}{(\Delta k.\frac{l}{2})} \equiv \dfrac{l}{2\pi}\lim\limits_{u \to 0}\dfrac{\sin u}{u} = \dfrac{l}{2\pi}$,

като в горния запис е използвано, че $\lim\limits_{u \to 0}\dfrac{\sin u}{u} = 1$. И така $A_{\max}(k_0) = \dfrac{l}{2\pi}$.

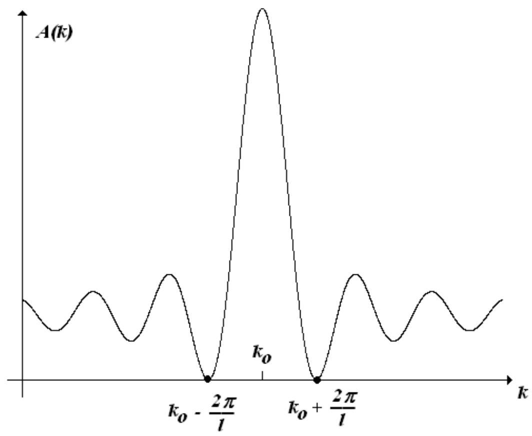
За да определим спектралната ширина $\Delta k = ?$ на вълната (*нужна ни е, защото **ако** $\Delta k = 0$, то **вълната ще бъде монохроматична**, но ако $\Delta k \neq 0$, то вълната няма да бъде монохроматична*), ще определим местоположенията на минимумите, „стоящи” от двете страни на максимума $A_{\max}(k_0) = \dfrac{l}{2\pi}$. За целта трябва да решим уравнението $A(k) = 0$,

т.е. $\dfrac{l}{2\pi}\dfrac{\sin(\Delta k.\frac{l}{2})}{(\Delta k.\frac{l}{2})} = 0$, или още $\sin(\Delta k.\frac{l}{2}) = 0$, което е изпълнено $\Leftrightarrow$ $\Delta k.\frac{l}{2} = n.\pi$, където $n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm \ldots\ldots$

Игнорираме тривиалния случай $n = 0$ и разглеждаме само случаите $n = \pm 1$, които ще ни дадат двата търсени от нас минимума. За тези две стойности на n изменението на вълновото число Δk ще бъде съответно $\Delta k = \dfrac{2}{l}n.\pi = \pm\dfrac{2\pi}{l}$.

Понеже интервалът на вълновите числа се дефинира като $\Delta k = k - k_0$, то двете стойности на вълновите числа, които съответстват на двата минимума, са $k_1^{\min} = k_0 - \dfrac{2\pi}{l}$ и $k_2^{\min} = k_0 + \dfrac{2\pi}{l}$ съответно.

Очевидно за тази вълна са „позволени” колебания с вълнови числа, лежащи в диапазон с ширина $\Delta k = k_2^{\min} - k_1^{\min} = \dfrac{4\pi}{l} \neq 0$, което доказва, че тази вълна **не е монохроматична.**



Полученият от нас резултат може да се представи и графично.

Амплитудата на тази вълна е различна от нула за стойности на вълновото число k в диапазона

$$k \in [k_0 - \frac{2\pi}{l}; k_0 + \frac{2\pi}{l}].$$

Монохроматичност бихме имали, ако $A(k) \neq 0$ само за $k = k_0$, а не за широк интервал от стойности на вълновото число k.

Като допълнение към тази задача ще покажем как от направените дотук разглеждания може да бъде получено съотношението за неопределеност. Действително, вече доказахме, че $\Delta k = \pm \dfrac{2\pi}{l}$, т.е. $\Delta k.l = \pm\, 2\pi$. Ако разгледаме само случая $\Delta k.l = +2\pi$, то след умножение на двете страни на това равенство с Планковата константа $\hbar$ и отчитане на съотношението $\hbar.\Delta k = \Delta p$ (Δp-изменение на импулса), ще имаме:

$(\hbar\Delta k).l = 2\pi.\hbar \equiv h \;\;\Rightarrow\;\; \Delta p.l = h$. Ако приемем (*формално*) $l = \Delta x$ (Δx-*неопределеност на координата*), то съотношението добива вида $\boxed{\Delta p.\Delta x = h}$.

Задача ❹: В момент $t = 0$ една частица се описва с вълновата функция $\psi(x,0) = A.e^{ik_0 x - \frac{x^2}{a^2}}$, където k_0, A, a са дадени реални константи. Да се определят коефициентите на Фурие-развитието (*развитието в ред на Фурие*) на тази функция.

Решение: Представяме функцията $\psi(x,0)$ чрез интеграл на Фурие:

(1) $$\psi(x,0) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(k)\, e^{ikx} dk\,,$$

където коефициентите в редовото развитие се дават с

(2) $$c(k) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x,0)\, e^{-ikx}dx = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} A.e^{ik_0 x - \frac{x^2}{a^2}}\, e^{-ikx}dx = \frac{A}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(k_0-k)x - \frac{x^2}{a^2}}\, dx\,.$$

Ако въведем означението $\Delta k = k - k_0$, то очевидно $k_0 - k = -\Delta k$ и следователно

(3) $$c(k) = \frac{A}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(k_0-k)x - \frac{x^2}{a^2}}\, dx = \frac{A}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(-\Delta k)x - \frac{x^2}{a^2}}\, dx = \frac{A}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\Delta kx - \frac{x^2}{a^2}}\, dx\,.$$

Нека разгледаме израза $-i.\Delta k.x - \dfrac{x^2}{a^2}$. Ако го представим във вида

$-i.\Delta k.x - \dfrac{x^2}{a^2} = -i.\Delta k.x.\dfrac{2a}{2a} - \dfrac{x^2}{a^2} = -\left[\left(\dfrac{x}{a}\right)^2 + 2.\left(\dfrac{x}{a}\right).\left(i.\dfrac{\Delta k.a}{2}\right)\right]$, то лесно бихме могли (чрез прибавяне и изваждане на члена $\left(\dfrac{\Delta k.a}{2}\right)^2$) да получим:

$$-i.\Delta k.x - \frac{x^2}{a^2} = -\left[\left(\frac{x}{a}\right)^2 + 2.\left(\frac{x}{a}\right).\left(i.\frac{\Delta k.a}{2}\right)\right] = -\left[\left(\frac{x}{a}\right)^2 + 2.\left(\frac{x}{a}\right).\left(i.\frac{\Delta k.a}{2}\right)\right] - \frac{(\Delta k)^2.a^2}{4} + \frac{(\Delta k)^2.a^2}{4} =$$

$$= -\left[\left(\frac{x}{a}\right)^2 + 2.\left(\frac{x}{a}\right).\left(i.\frac{\Delta k.a}{2}\right) - \frac{(\Delta k)^2.a^2}{4}\right] - \frac{(\Delta k)^2.a^2}{4} = -\left[\frac{x}{a} + i.\frac{\Delta k.a}{2}\right]^2 - \frac{(\Delta k)^2.a^2}{4}\,.$$

С така намереното представяне за $-i.\Delta k.x - \dfrac{x^2}{a^2} = -\left[\dfrac{x}{a} + i.\dfrac{\Delta k.a}{2}\right]^2 - \dfrac{(\Delta k)^2.a^2}{4}$ заместваме в (3)

$$c(k)=\frac{A}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-i\Delta kx-\frac{x^2}{a^2}}\,dx=\frac{A}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\left[\frac{x}{a}+i.\frac{\Delta k.a}{2}\right]^2-\frac{(\Delta k)^2.a^2}{4}}\,dx=\frac{A}{2\pi}.e^{-\frac{(\Delta k)^2.a^2}{4}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\left[\frac{x}{a}+i.\frac{\Delta k.a}{2}\right]^2}\,dx=$$

$$=\frac{A.a}{2\pi}.e^{-\frac{(\Delta k)^2.a^2}{4}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\left[\frac{x}{a}+i.\frac{\Delta k.a}{2}\right]^2}\,d\left(\frac{x}{a}+i.\frac{\Delta k.a}{2}\right)=$$

$$\ldots\ \textit{полагаме}\ \frac{x}{a}+i.\frac{\Delta k.a}{2}=u\ \ldots$$

$$=\frac{A.a}{2\pi}.e^{-\frac{(\Delta k)^2.a^2}{4}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-u^2}\,du=\frac{A.a}{2\pi}.e^{-\frac{(\Delta k)^2.a^2}{4}}\sqrt{\pi}\,,$$

където е използвано, че интегралът $\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-u^2}\,du=\sqrt{\pi}}$ (*интеграл на Поасон*).

Така за търсеното в задачата представяне на коефициентите на Фурие-развитието на тази функция получаваме окончателно

$$c(k)=\frac{A.a}{2\pi}.\sqrt{\pi}.e^{-\frac{(\Delta k)^2.a^2}{4}}\equiv\frac{A.a}{2\pi}.\sqrt{\pi}.e^{-\frac{(k-k_0)^2.a^2}{4}}\,. \tag{4}$$

📖

Тема: Оператори. Алгебра на оператори. Комутатори

Теоретичен минимум: при работа с оператори се прилага следното правило: когато върху една функция ψ действат няколко оператора, то пръв (*по поредност*) се прилага операторът, стоящ най-близко до функцията в операторния запис. След това върху резултата от това действие се прилага втория по поредност на своето „местоположение” оператор, и т.н.

$$\underbrace{\hat{A}\ \underbrace{\hat{B}\ \underbrace{\hat{C}\ \psi}_{\varphi}}_{\varphi_1}}\qquad\qquad \hat{A}^n\psi=\underbrace{\hat{A}\ldots\ldots\hat{A}}_{n-\text{пъти}}\ \psi$$

<u>Основни квантовомеханични оператори</u>:

① **Оператор на координатата** $\hat{\vec{r}}$:

$\vec{r}\to\hat{\vec{r}}$, $\quad\hat{\vec{r}}\,(\hat{x},\hat{y},\hat{z})$, $\quad$ или по компоненти: $\quad\hat{x}\equiv x$, $\quad\hat{y}\equiv y$, $\quad\hat{z}\equiv z$.

② **Оператор на импулса** $\hat{\vec{p}}$:

На импулса се съпоставя оператор на импулса $\vec{p}\to\hat{\vec{p}}\equiv-i\hbar\nabla$,

където $\nabla=\left(\frac{\partial}{\partial x},\frac{\partial}{\partial y},\frac{\partial}{\partial z}\right)$ е „*набла*”-оператор . Проекциите на оператора на импулса са

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

Може да се дефинира и оператор на квадрата на момента на импулса

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

където $\Delta=\nabla^2\equiv\nabla.\nabla=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$ е оператор на Лаплас.

③ **Оператор на кинетичната енергия** $\hat{T}$:

$$T = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad \to \quad \hat{T} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} = \frac{(-i\hbar\nabla)^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta .$$

④ **Оператор на Хамилтон** $\hat{H}$:

$$H = T + U \quad \to \quad \hat{H} = \hat{T} + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U ,$$

където $\hat{U} = U(x, y, z)$ е оператор на потенциалната енергия.

Зависещ от времето оператор на Хамилтон:

$$H \quad \to \quad \hat{H} = i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}.$$

⑤ **Оператор на момента на импулса** $\hat{\vec{L}}$:

$$\vec{L} = (\vec{r} \times \vec{p}) \quad \to \quad \hat{\vec{L}} = (\hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}) = -i\hbar(\vec{r} \times \nabla)$$

$$\hat{\vec{L}} \equiv \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} = -i\hbar(\vec{r} \times \nabla) = \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ x & y & z \\ \dfrac{\partial}{\partial x} & \dfrac{\partial}{\partial y} & \dfrac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix} =$$

$$= \left[-i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\right]\vec{e}_x + \left[-i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\right]\vec{e}_y + \left[-i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\right]\vec{e}_z ,$$

следователно за компонентите на оператора на момента на количеството на движение можем да запишем

$$\hat{L}_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \quad \hat{L}_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right), \quad \hat{L}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right),$$

като $\hat{\vec{L}} = \hat{L}_x\vec{e}_x + \hat{L}_y\vec{e}_y + \hat{L}_z\vec{e}_z$.

⑥ **Оператор на квадрата на момента на импулса** $\hat{L}^2$:

В сферични координати

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

⑦ **Оператор на спин(а)** $\hat{\vec{S}}$:

Спинът е **квантовомеханична характеристика** на микрочастиците, нямаща аналог в класическата физика. По дефиниция това е операторът

$$\hat{\vec{S}} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z),$$

или по „компоненти”

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_x, \qquad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_y, \qquad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_z,$$

където $\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $\quad \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ са **матрици на Паули**.

⑧ **Оператор на пространствените отражения** $\hat{p}$ **:**

$$\hat{p}\psi(\vec{r},t)=\psi(-\vec{r},t).$$

При решаването на задачи, характеризиращи се със **сферична симетрия**, е полезно да се използва някое от следните представяния на оператори **в сферични координати**:

а) набла-оператор:

$$\nabla=\frac{\partial}{\partial r}\vec{e}_r+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\vec{e}_\theta+\frac{1}{r.\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\vec{e}_\varphi,$$

б) оператор на Лаплас:

$$\Delta=\frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right],$$

като представен по този начин, операторът на Лаплас може да се запише още във вида

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

където

$$\Delta_r=\frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)$$ - **радиална** част на оператора на Лаплас,

$$\Delta_{\theta,\varphi}=\frac{1}{\sin\theta}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$ - „**ъглова**" част на оператора на Лаплас.

в) оператор на момента на импулса:

$$\hat{\vec{L}}\equiv\hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{p}}=-i\hbar(\vec{r}\times\nabla)=-i\hbar\left(\vec{e}_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{\vec{e}_\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),$$

г) оператор на квадрата на момента на импулса:

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

Задача ❶:

а) Даден е оператор $\hat{A}=\left(x+\frac{d}{dx}\right)$. Да се определи квадратът му $\hat{A}^2=?$

б) Даден е операторът $\hat{A}=\left(\frac{1}{x}+\frac{d}{dx}\right)$. Да се определи $\hat{A}^3=?$

Решения:

а) Прилагаме $\hat{A}^2$ по отношение на функция $\psi(x)$:

$$\hat{A}^2\psi(x)=\left(x+\frac{d}{dx}\right)^2\psi(x)=\left(x+\frac{d}{dx}\right)\left(x+\frac{d}{dx}\right)\psi(x)=\left(x+\frac{d}{dx}\right)\left[x\psi(x)+\frac{d\psi(x)}{dx}\right]=$$

$$=x\left[x\psi(x)+\frac{d\psi(x)}{dx}\right]+\frac{d}{dx}\left[x\psi(x)+\frac{d\psi(x)}{dx}\right]=$$

$$= x^2\psi(x) + x\frac{d\psi(x)}{d\,x} + \psi(x) + x\frac{d\psi(x)}{d\,x} + \frac{d^2\psi(x)}{d\,x^2} =$$

$$= \left(\frac{d^2}{d\,x^2} + 2x\frac{d}{d\,x} + x^2 + 1\right)\psi(x).$$ И така

$$\hat{A}^2\psi(x) = \left(\frac{d^2}{d\,x^2} + 2x\frac{d}{d\,x} + x^2 + 1\right)\psi(x),$$

откъдето следва, че търсеният квадрат на оператора е $\hat{A}^2 = \frac{d^2}{d\,x^2} + 2x\frac{d}{d\,x} + x^2 + 1$.

б) Очевидно $\hat{A}^3 = \hat{A}\hat{A}\hat{A}$. Действаме с оператора $\hat{A}^3$ върху функция $\psi(x)$:

$$\hat{A}^3\psi(x) = \hat{A}\hat{A}\hat{A}\psi(x) = \left(\frac{1}{x} + \frac{d}{d\,x}\right)\left(\frac{1}{x} + \frac{d}{d\,x}\right)\left(\frac{1}{x} + \frac{d}{d\,x}\right)\psi(x) =$$

$$= \left(\frac{1}{x} + \frac{d}{d\,x}\right)\left(\frac{1}{x}\left[\frac{1}{x}\psi(x) + \frac{d\psi(x)}{d\,x}\right] + \frac{d}{d\,x}\left[\frac{1}{x}\psi(x) + \frac{d\psi(x)}{d\,x}\right]\right) =$$

$$= \left(\frac{1}{x} + \frac{d}{d\,x}\right)\left(\frac{1}{x^2}\psi(x) + \frac{1}{x}\frac{d\psi(x)}{d\,x} - \frac{1}{x^2}\psi(x) + \frac{1}{x}\frac{d\psi(x)}{d\,x} + \frac{d^2\psi(x)}{d\,x^2}\right) =$$

$$= \left(\frac{1}{x} + \frac{d}{d\,x}\right)\left(\frac{2}{x}\frac{d\psi(x)}{d\,x} + \frac{d^2\psi(x)}{d\,x^2}\right) =$$

$$= \frac{1}{x}\frac{2}{x}\frac{d\psi(x)}{d\,x} + \frac{1}{x}\frac{d^2\psi(x)}{d\,x^2} + \frac{d}{d\,x}\left[\frac{2}{x}\right]\frac{d\psi(x)}{d\,x} + \frac{2}{x}\frac{d^2\psi(x)}{d\,x^2} + \frac{d^3\psi(x)}{d\,x^3} =$$

$$= \frac{2}{x^2}\frac{d\psi(x)}{d\,x} + \frac{3}{x}\frac{d^2\psi(x)}{d\,x^2} - \frac{2}{x^2}\frac{d\psi(x)}{d\,x} + \frac{d^3\psi(x)}{d\,x^3} = \frac{3}{x}\frac{d^2\psi(x)}{d\,x^2} + \frac{d^3\psi(x)}{d\,x^3} =$$

$$= \left(\frac{3}{x}\frac{d^2}{d\,x^2} + \frac{d^3}{d\,x^3}\right)\psi(x).$$

И така доказахме, че

$\hat{A}^3\psi(x) = \left(\frac{3}{x}\frac{d^2}{d\,x^2} + \frac{d^3}{d\,x^3}\right)\psi(x)$, откъдето следва, че $\hat{A}^3 = \frac{3}{x}\frac{d^2}{d\,x^2} + \frac{d^3}{d\,x^3}$.

Задача ❷

а) даден е комутаторът $[\hat{A}, \hat{B}] = 1$. Да се докаже, че $\hat{A}\hat{B}^2 - \hat{B}^2\hat{A} = 2\hat{B}$,

б) да се докаже, че $[\hat{A}^2, \hat{B}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{A} + \hat{A}[\hat{A}, \hat{B}]$.

Решение:

а) По условие $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 1$, т.е.

(1) $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 1 \qquad \Big| .\hat{B}$

Нека да приложим операторното равенство (1) спрямо $\hat{B}$ (т.е. $\hat{B}$ е „**отдясно**”):

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

Ако върху (1) подействаме с оператора $\hat{B}$ „**отляво**”, т.е.

$\hat{B}.\Big|\qquad \hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}=1,$

ще получим равенството

(3) $\quad \hat{B}\hat{A}\hat{B}-\hat{B}^2\hat{A}=\hat{B}$.

Нека съберем почленно операторните равенства (2) и (3)

(4) $\quad \hat{A}\hat{B}^2-\hat{B}^2\hat{A}=2\hat{B}$.

б) Изхождаме от представянето

(5) $\quad [\hat{A},\hat{B}]=\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}$.

Умножаваме (5) с $\hat{A}$ веднъж отдясно, а след това отляво (*както в предния пример*):

($6^А$) $\quad [\hat{A},\hat{B}]\hat{A}=\hat{A}\hat{B}\hat{A}-\hat{B}\hat{A}\hat{A}=\hat{A}\hat{B}\hat{A}-\hat{B}\hat{A}^2$;

($6^Б$) $\quad \hat{A}[\hat{A},\hat{B}]=\hat{A}\hat{A}\hat{B}-\hat{A}\hat{B}\hat{A}=\hat{A}^2\hat{B}-\hat{A}\hat{B}\hat{A}$.

Събираме почленно ($6^А$) и ($6^Б$) и получаваме

(7) $\quad [\hat{A},\hat{B}]\hat{A}+\hat{A}[\hat{A},\hat{B}]=\hat{A}\hat{B}\hat{A}-\hat{B}\hat{A}^2+\hat{A}^2\hat{B}-\hat{A}\hat{B}\hat{A}=\hat{A}^2\hat{B}-\hat{B}\hat{A}^2\equiv[\hat{A}^2,\hat{B}]$,

с което всъщност доказваме, че $[\hat{A}^2,\hat{B}]=[\hat{A},\hat{B}]\hat{A}+\hat{A}[\hat{A},\hat{B}]$.

С помощта на доказаното твърдение могат да бъдат определени напр. комутационните съотношения между оператора на квадрата на момента на импулса $\hat{L}^2$ и коя да е проекция на оператора на момента на импулса, напр. $[\hat{L}^2,\hat{L}_z]$, което ще бъде направено в отделна задача.

Задача ❸: За представените по-долу комутатори да се докаже:

а) $[\hat{x},\hat{p}_x]=i\hbar,\qquad [\hat{y},\hat{p}_y]=i\hbar,\qquad [\hat{z},\hat{p}_x]=i\hbar$

б) $[\hat{x}_i,\hat{p}_j]=0,\qquad i,j=1,2,3,\qquad$ за $\quad i\neq j$.

Решения:

а) Нека приложим комутативния оператор $[\hat{x},\hat{p}_x]$ спрямо вълнова функция $\psi(x)$. Ще имаме:

$$[\hat{x},\hat{p}_x]\psi(x)=(\hat{x}\hat{p}_x-\hat{p}_x\hat{x})\psi(x)=\hat{x}\hat{p}_x\psi(x)-\hat{p}_x\hat{x}\psi(x)=x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\big(\psi(x)\big)\right)+i\hbar\frac{\partial}{\partial x}x\psi(x)=$$

$$=-i\hbar x\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}+i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\psi(x))=-i\hbar x\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}+i\hbar\psi(x)+i\hbar x\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}=i\hbar\psi(x).$$

Щом $[\hat{x},\hat{p}_x]\psi(x)=i\hbar\psi(x)$, то очевидно $[\hat{x},\hat{p}_x]=i\hbar\quad\neq 0$, или още $\hat{x}\hat{p}_x-\hat{p}_x\hat{x}=i\hbar$, което доказва, че операторите $\hat{x}\equiv x$ и $\hat{p}_x=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$ **не комутират**. Напълно аналогично се доказва, че:

$\hat{y}\,\hat{p}_y-\hat{p}_y\hat{y}=i\hbar$,

$\hat{z}\,\hat{p}_z-\hat{p}_z\hat{z}=i\hbar$.

Фактът, че **едноименните проекции** на операторите на координатата и на импулса не комутират означава, че **те <u>не могат</u> да бъдат едновременно измерени**.

б) Нека приложим оператора $\hat{p}_j\hat{x}_i$ спрямо вълнова функция $\psi(x)$. Ще имаме:

(1) $\hat{p}_j \hat{x}_i \psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \hat{x}_i \psi \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j}(\hat{x}_i \psi) = -i\hbar \frac{\partial \hat{x}_i}{\partial x_j}\psi + \hat{x}_i\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j}\psi\right) =$

$= -i\hbar\delta_{ij}\psi + \hat{x}_i \hat{p}_j \psi = 0 + \hat{x}_i \hat{p}_j \psi \equiv \hat{x}_i \hat{p}_j \psi$.

Щом $\hat{p}_j \hat{x}_i \psi = \hat{x}_i \hat{p}_j \psi$, то очевидно

(2) $\hat{x}_i \hat{p}_j \psi - \hat{p}_j \hat{x}_i \psi = 0$,

откъдето следва, че комутаторът $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = \hat{x}_i \hat{p}_j - \hat{p}_j \hat{x}_i = 0$.

Оказва се, че **разноименните проекции** на операторите на координатата и на импулса комутират, което означава, че **те <u>могат</u> да бъдат едновременно измерени**.

Задача ❹: Пресметнете комутатора $[\hat{p}^2, \hat{p}] = ?$

Решение:

1 начин: $\hat{p} = -i\hbar\nabla$, $\hat{p}^2 = -\hbar^2 \Delta$, следователно

$\hat{p}^2 \hat{p}\psi = -\hbar^2 \Delta(-i\hbar\nabla\psi) = i\hbar^3\Delta(\nabla\psi) = i\hbar^3\Delta(grad\,\psi) =$

$= i\hbar^3\Delta(grad\,\psi) = i\hbar^3[grad\,div(grad\,\psi) - rot\,rot\,(grad\,\psi)] =$

$= i\hbar^3[grad\,(div\,grad\,\psi) - rot\,(rot\,grad\,\psi)] = i\hbar^3[grad\,(\Delta\psi) - rot\,(0.\psi)] =$

$= i\hbar^3\nabla(\Delta\psi) = (-i\hbar\nabla)(-\hbar^2\Delta\psi) = \hat{p}\,\hat{p}^2\,\psi$.

Щом $\hat{p}^2 \hat{p}\psi = \hat{p}\,\hat{p}^2\,\psi$, то $[\hat{p}^2, \hat{p}] = \hat{p}^2\hat{p} - \hat{p}\,\hat{p}^2 = 0$.

2 начин: в задача 3 бе доказано, че комутаторът $[\hat{A}^2, \hat{B}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{A} + \hat{A}[\hat{A}, \hat{B}]$. Ако приложим тази формула за случая $\hat{A}^2 \equiv \hat{p}^2$ и $\hat{B} = \hat{p}$, ще имаме

$[\hat{p}^2, \hat{p}] = [\hat{p}, \hat{p}]\,\hat{p} + \hat{p}[\hat{p}, \hat{p}]$.

Но $[\hat{p}, \hat{p}] \equiv 0$, понеже всеки оператор комутира сам със себе си, следователно $[\hat{p}^2, \hat{p}] = 0$.

Задача ❺: Пресметнете комутаторите между следните оператори:

а) оператора на координатата $\hat{x}$ и оператора на Лаплас Δ;

б) оператора на координатата $\hat{x}$ и оператора на кинетичната енергия $\hat{T} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}$.

Решения:

а) Нека най-напред определим комутатора на операторите $\hat{x} = x$ и $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$. Прилагаме дефиницията за комутатор, което в нашия случай означава да пресметнем

(1) $[\hat{x}, \Delta] = \hat{x}\Delta - \Delta\hat{x}$.

За целта прилагаме оператора $[\hat{x}, \Delta]$ спрямо функция $\psi = \psi(x, y, z)$:

$$[\hat{x}, \Delta]\psi = (\hat{x}\Delta - \Delta\hat{x})\psi = x\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi - \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)x\psi =$$

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

$$=x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+x\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+x\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}-\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}(x\psi)+\frac{\partial^2}{\partial y^2}(x\psi)+\frac{\partial^2}{\partial z^2}(x\psi)\right]=$$

$$=x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+x\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+x\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}-\left[\frac{\partial}{\partial x}\left(\psi+x\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)-x\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}-x\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right]=$$

$$=x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}-\frac{\partial\psi}{\partial x}-\frac{\partial\psi}{\partial x}-x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=-2\frac{\partial\psi}{\partial x}.$$

И така доказахме, че $[\hat{x},\Delta]\psi=\left(-2\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi$, откъдето следва, че

(2) $[\hat{x},\Delta]=-2\frac{\partial}{\partial x}\neq 0$, т.е. двата оператора не комутират.

По аналогичен начин може да бъде доказано, че

$$[\hat{y},\Delta]=-2\frac{\partial}{\partial y}\neq 0 \qquad \text{и} \qquad [\hat{z},\Delta]=-2\frac{\partial}{\partial z}\neq 0.$$

б) Както е известно операторът на кинетичната енергия се изразява посредством оператора на Лаплас:

$$\hat{T}=\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}=\frac{(-i\hbar\nabla)^2}{2m}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta,$$

където $\hat{\vec{p}}=-i\hbar\nabla$ е оператора на импулса. От това, че $\hat{T}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$ и от току-що доказаното $[\hat{x},\Delta]\neq 0$ можем да направим извода, че операторът на координатата и операторът на кинетичната енергия също не комутират, следователно ако знаем координатата x, то нищо не можем да кажем за точната стойност на кинетичната енергия, и обратно. Нека определим (*в явен вид*) различната от нула стойност на комутатора на координатата x и кинетичната енергия $T=\frac{\vec{p}^2}{2m}$:

$$[\hat{x},\hat{T}]=(\hat{x}\hat{T}-\hat{T}\,\hat{x})=x\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\right)-\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\right)x=-\frac{\hbar^2}{2m}x\Delta+\frac{\hbar^2}{2m}\Delta x=-\frac{\hbar^2}{2m}(\hat{x}\Delta-\Delta\hat{x})=$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}[\underbrace{\hat{x},\Delta}_{\text{от подусл.}(a)}]=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-2\frac{\partial}{\partial x}\right)=\frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial}{\partial x}, \text{ т.е.}$$

(3) $[\hat{x},\hat{T}]=\frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial}{\partial x}=\frac{(-i)}{(-i)}\frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial}{\partial x}=\frac{\hbar}{(-i)m}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)=\frac{(-i)}{(-i)}\frac{\hbar}{(-i)m}\hat{p}_x=\frac{i\hbar}{m}\hat{p}_x.$

Понеже $\hat{H}=\hat{T}+\hat{U}$, а $\hat{x}$ и $\hat{U}$ са два оператора, които комутират помежду си, то лесно може да се докаже, че от (3) следва

(4) $[\hat{x},\hat{H}]=i\hbar\,\frac{\hat{p}_x}{m}.$

Действително:

$$[\hat{x},\hat{H}]\psi=\hat{x}\,\hat{H}\psi-\hat{H}\,\hat{x}\psi=\hat{x}\,\frac{\hat{p}_x{}^2}{2m}\psi+\hat{x}\hat{U}\psi-\frac{\hat{p}_x{}^2}{2m}\hat{x}\psi-\hat{U}\,\hat{x}\psi=$$

$$= x\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi - \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{\partial^2}{\partial x^2}(x\psi) + (\hat{x}\hat{U} - \hat{U}\,\hat{x})\psi =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}x\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(x\psi) + 0.\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}x\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x}(\psi + x\frac{\partial\psi}{\partial x}) =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}x\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + \frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial\psi}{\partial x} + \frac{\partial\psi}{\partial x} + x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}) = -\frac{\hbar^2}{2m}x\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + \frac{\hbar^2}{2m}2\frac{\partial\psi}{\partial x} + \frac{\hbar^2}{2m}x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} =$$

$$= \frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial\psi}{\partial x} = \frac{i\hbar}{m}(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\psi = \frac{i\hbar}{m}\hat{p}_x\psi\,,$$

с което доказахме, че $[\hat{x},\hat{H}] = \frac{i\hbar}{m}\hat{p}_x$.

Комутаторът $[\hat{x},\hat{H}]$ може да бъде пресметнат още и по следния начин. Съгласно един от резултатите от зад. 4:

(5) $[\hat{x},\hat{p}_x] = i\hbar$,

т.е. $\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} = i\hbar$, откъдето следва, че

(6.а) $\hat{x}\hat{p}_x = \hat{p}_x\hat{x} + i\hbar$, или (6.б) $\hat{p}_x\hat{x} = \hat{x}\hat{p}_x - i\hbar$

Ако приемем, че хамилтонианът има вида

(7) $$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + \hat{U}(x,y,z),$$

то очевидно $\hat{x}$ ще комутира с $U(x,y,z)$, както и с $\hat{p}_y$ и $\hat{p}_z$ (виж зад. 4), и няма да комутира единствено с $\hat{p}_x$, т.е. и с $\hat{p}_x^2$. Ето защо

(8) $$[\hat{x},\hat{H}] = \hat{x}\hat{H} - \hat{H}\,\hat{x} = \frac{1}{2m}[\hat{x}\hat{p}_x{}^2 - \hat{p}_x{}^2\hat{x}] = \frac{1}{2m}[\hat{x}\hat{p}_x\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{p}_x\hat{x}] = \frac{1}{2m}[(\hat{x}\hat{p}_x)\hat{p}_x - \hat{p}_x(\hat{p}_x\hat{x})]$$

Ако за операторите $(\hat{x}\hat{p}_x)$ и $(\hat{p}_x\hat{x})$ в дясната страна на (9) използваме представянията (6.а) и (6.б), то ще имаме

(10) $$[\hat{x},\hat{H}] = \frac{1}{2m}[(\hat{p}_x\hat{x} + i\hbar)\hat{p}_x - \hat{p}_x(\hat{x}\hat{p}_x - i\hbar)] = \frac{1}{2m}[\hat{p}_x\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x}\hat{p}_x + 2i\hbar\hat{p}_x] = \frac{2i\hbar}{2m}\hat{p}_x = \frac{i\hbar}{m}\hat{p}_x,$$

с което доказахме, че действително $\boxed{[\hat{x},\hat{H}] = \frac{i\hbar}{m}\hat{p}_x}$.

Обобщение: по аналогичен начин може да бъде доказано, че $\boxed{[\hat{y},\hat{H}] = \frac{i\hbar}{m}\hat{p}_y}$ и $\boxed{[\hat{z},\hat{H}] = \frac{i\hbar}{m}\hat{p}_z}$. Щом компонентите на оператора на координатата и импулса удовлетворяват горните 3 комутационни съотношения, то и самите оператори следва да го удовлетворяват тъждествено, т.е.

(11) $\boxed{[\hat{r},\hat{H}] = \frac{i\hbar}{m}\hat{p}}$.

Задача ❻: Да се докажат комутационните съотношения:

а) $[\hat{L}_x,\hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z$, $[\hat{L}_y,\hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x$, $[\hat{L}_z,\hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y$;

б) $[\hat{L}^2,\hat{L}_x] = 0$, $[\hat{L}^2,\hat{L}_y] = 0$, $[\hat{L}^2,\hat{L}_z] = 0$.

Решения:

а) Нека разгледаме един от възможните комутатори, напр. $[\hat{L}_x,\hat{L}_y]$. За целта действаме с оператора $[\hat{L}_x,\hat{L}_y]$ на функция $\psi(x,y,z)$:

$$[\hat{L}_x,\hat{L}_y]\psi(x,y,z)=(\hat{L}_x\hat{L}_y-\hat{L}_y\hat{L}_x)\psi=\hat{L}_x\hat{L}_y\psi-\hat{L}_y\hat{L}_x\psi=$$
$$=-\hbar^2\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right)\psi+\hbar^2\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right)\psi=$$
$$=-\hbar^2\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(z\frac{\partial\psi}{\partial x}-x\frac{\partial\psi}{\partial z}\right)+\hbar^2\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(y\frac{\partial\psi}{\partial z}-z\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)=$$
$$=-\hbar^2 y\frac{\partial}{\partial z}\left(z\frac{\partial\psi}{\partial x}-x\frac{\partial\psi}{\partial z}\right)+\hbar^2 z\frac{\partial}{\partial y}\left(z\frac{\partial\psi}{\partial x}-x\frac{\partial\psi}{\partial z}\right)+$$
$$+\hbar^2 z\frac{\partial}{\partial x}\left(y\frac{\partial\psi}{\partial z}-z\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)-\hbar^2 x\frac{\partial}{\partial z}\left(y\frac{\partial\psi}{\partial z}-z\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)=$$
$$=-\hbar^2 y\frac{\partial\psi}{\partial x}-\hbar^2 yz\frac{\partial^2\psi}{\partial z\partial x}+\hbar^2 yx\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}+\hbar^2 z^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial y}-\hbar^2 zx\frac{\partial^2\psi}{\partial z\partial y}+$$
$$+\hbar^2 zy\frac{\partial^2\psi}{\partial z\partial x}-\hbar^2 z^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial y}-\hbar^2 xy\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}+\hbar^2 x\frac{\partial\psi}{\partial y}+\hbar^2 xz\frac{\partial^2\psi}{\partial y\partial z}=$$
$$=\hbar^2\left(x\frac{\partial\psi}{\partial y}-y\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)=\hbar^2\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi=i\hbar(-i\hbar)\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi=i\hbar\,\hat{L}_z\psi\,,$$

следователно

(1) $\quad [\hat{L}_x,\hat{L}_y]\equiv\hat{L}_x\hat{L}_y-\hat{L}_y\hat{L}_x=i\hbar\,\hat{L}_z$.

По напълно аналогичен начин се доказват и другите две комутационни съотношения:

(2) $\quad [\hat{L}_y,\hat{L}_z]\equiv\hat{L}_y\hat{L}_z-\hat{L}_z\hat{L}_y=i\hbar\,\hat{L}_x$, и

(3) $\quad [\hat{L}_z,\hat{L}_x]\equiv\hat{L}_z\hat{L}_x-\hat{L}_x\hat{L}_z=i\hbar\,\hat{L}_y$.

<u>**Извод**</u>: Щом кои да е две проекции на оператора на момента на импулса не комутират (*т.е. имат комутатор* $\neq 0$), то следователно те не могат едновременно да бъдат измерени. Освен това (*пак като следствие от гореказаното*) те нямат и обща собствена функция.

б) Да се докажат съотношенията: $[\hat{L}^2,\hat{L}_x]=0$, $\quad [\hat{L}^2,\hat{L}_y]=0$, $\quad [\hat{L}^2,\hat{L}_z]=0$.

Решение: Оказва се, че операторът $\hat{\vec{L}}^2$ комутира с всяка от проекциите на оператора на момента на импулса $\hat{\vec{L}}$. За да докажем това твърдение, нека най-напред отбележим, че тъй като $\hat{\vec{L}}=\hat{L}_x\vec{e}_x+\hat{L}_y\vec{e}_y+\hat{L}_z\vec{e}_z$, то

$$\hat{\vec{L}}^2=\hat{\vec{L}}.\hat{\vec{L}}=(\hat{L}_x\vec{e}_x+\hat{L}_y\vec{e}_y+\hat{L}_z\vec{e}_z).(\hat{L}_x\vec{e}_x+\hat{L}_y\vec{e}_y+\hat{L}_z\vec{e}_z)=$$
$$=\hat{L}_x^{\,2}(\vec{e}_x.\vec{e}_x)+\hat{L}_x\hat{L}_y(\vec{e}_x.\vec{e}_y)+\hat{L}_x\hat{L}_z(\vec{e}_x.\vec{e}_z)+\hat{L}_x\hat{L}_y(\vec{e}_x.\vec{e}_y)+\hat{L}_y^{\,2}(\vec{e}_y.\vec{e}_y)+\hat{L}_y\hat{L}_z(\vec{e}_y.\vec{e}_z)+$$
$$+\hat{L}_x\hat{L}_z(\vec{e}_x.\vec{e}_z)+\hat{L}_y\hat{L}_z(\vec{e}_y.\vec{e}_z)+\hat{L}_z^{\,2}(\vec{e}_z.\vec{e}_z)=\hat{L}_x^{\,2}+\hat{L}_y^{\,2}+\hat{L}_z^{\,2}\,,$$

понеже $(\vec{e}_i.\vec{e}_j)=\begin{cases}0, & i\neq j\\ 1, & i=j\end{cases}$, където $i,j=x,y,z$. И така,

(4) $\hat{\vec{L}}^2=\hat{L}_x{}^2+\hat{L}_y{}^2+\hat{L}_z{}^2$,

следователно можем да определим комутатора на $\hat{\vec{L}}^2$ и една от проекциите на момента на импулса, напр. $\hat{L}_x$:

<u>Първи начин</u>:

$$[\hat{\vec{L}}^2,\hat{L}_x]\psi=[(\hat{L}_x{}^2+\hat{L}_y{}^2+\hat{L}_z{}^2)\hat{L}_x-\hat{L}_x(\hat{L}_x{}^2+\hat{L}_y{}^2+\hat{L}_z{}^2)]\psi=$$
$$=(\hat{L}_x{}^2+\hat{L}_y{}^2+\hat{L}_z{}^2)\hat{L}_x\psi-\hat{L}_x(\hat{L}_x{}^2+\hat{L}_y{}^2+\hat{L}_z{}^2)\psi=$$
$$=\hat{L}_x{}^3\psi+\hat{L}_y\hat{L}_y\hat{L}_x\psi+\hat{L}_z\hat{L}_z\hat{L}_x\psi-\hat{L}_x{}^3\psi-\hat{L}_x\hat{L}_y\hat{L}_y\psi-\hat{L}_x\hat{L}_z\hat{L}_z\psi=$$
$$=\hat{L}_y\{\hat{L}_y\hat{L}_x\}\psi+\hat{L}_z\{\hat{L}_z\hat{L}_x\}\psi-\{\hat{L}_x\hat{L}_y\}\hat{L}_y\psi-\{\hat{L}_x\hat{L}_z\}\hat{L}_z\psi.$$

В най-последния запис 4 двойки оператори съзнателно са заградени в скоби, за да може за тях да се приложат доказаните вече в първото подусловие на задачата комутационни съотношения за проекциите на оператора на момента на импулса:

$$\hat{L}_x\hat{L}_y-\hat{L}_y\hat{L}_x=i\hbar\,\hat{L}_z\quad\Rightarrow\quad\begin{cases}\hat{L}_y\hat{L}_x=\hat{L}_x\hat{L}_y-i\hbar\,\hat{L}_z\\ \hat{L}_x\hat{L}_y=i\hbar\,\hat{L}_z+\hat{L}_y\hat{L}_x\end{cases};$$

$$\hat{L}_y\hat{L}_z-\hat{L}_z\hat{L}_y=i\hbar\,\hat{L}_x\quad\Rightarrow\quad\begin{cases}\hat{L}_z\hat{L}_y=\hat{L}_y\hat{L}_z-i\hbar\,\hat{L}_x\\ \hat{L}_y\hat{L}_z=i\hbar\,\hat{L}_x+\hat{L}_z\hat{L}_y\end{cases};$$

$$\hat{L}_z\hat{L}_x-\hat{L}_x\hat{L}_z=i\hbar\,\hat{L}_y\quad\Rightarrow\quad\begin{cases}\hat{L}_x\hat{L}_z=\hat{L}_z\hat{L}_x-i\hbar\,\hat{L}_y\\ \hat{L}_z\hat{L}_x=i\hbar\,\hat{L}_y+\hat{L}_x\hat{L}_z\end{cases}.$$

Така получаваме

$$[\hat{\vec{L}}^2,\hat{L}_x]\psi=\hat{L}_y\{\hat{L}_y\hat{L}_x\}\psi+\hat{L}_z\{\hat{L}_z\hat{L}_x\}\psi-\{\hat{L}_x\hat{L}_y\}\hat{L}_y\psi-\{\hat{L}_x\hat{L}_z\}\hat{L}_z\psi=$$
$$=\hat{L}_y(\hat{L}_x\hat{L}_y-i\hbar\,\hat{L}_z)\psi+\hat{L}_z(i\hbar\,\hat{L}_y+\hat{L}_x\hat{L}_z)\psi-(i\hbar\,\hat{L}_z+\hat{L}_y\hat{L}_x)\hat{L}_y\psi-(\hat{L}_z\hat{L}_x-i\hbar\,\hat{L}_y)\hat{L}_z\psi=$$
$$=\hat{L}_y\hat{L}_x\hat{L}_y\psi-i\hbar\,\hat{L}_y\hat{L}_z\psi+i\hbar\hat{L}_z\hat{L}_y\psi+\hat{L}_z\hat{L}_x\hat{L}_z\psi-i\hbar\,\hat{L}_z\hat{L}_y\psi-\hat{L}_y\hat{L}_x\hat{L}_y\psi-\hat{L}_z\hat{L}_x\hat{L}_z\psi+i\hbar\,\hat{L}_y\hat{L}_z\psi=$$
$$=0.\psi,$$

следователно

(5) $[\hat{\vec{L}}^2,\hat{L}_x]=0$.

<u>Втори начин</u>: Нека определим $[\hat{\vec{L}}^2,\hat{L}_x]$, използвайки доказаната в задача 3^{Б} формула

(*) $[\hat{A}^2,\hat{B}]=[\hat{A},\hat{B}]\hat{A}+\hat{A}[\hat{A},\hat{B}]$.

За целта използваме, че съгласно (4) $\hat{\vec{L}}^2=\hat{L}_x{}^2+\hat{L}_y{}^2+\hat{L}_z{}^2$, следователно

(6) $[\hat{\vec{L}}^2,\hat{L}_x]=[\hat{L}_x{}^2,\hat{L}_x]+[\hat{L}_y{}^2,\hat{L}_x]+[\hat{L}_z{}^2,\hat{L}_x]$.

Прилагаме формула (*) за определянето на всеки един от трите комутатора в (6), а именно

(7^А) $[\hat{L}_x^{\,2},\hat{L}_x]=[\hat{L}_x,\hat{L}_x]\hat{L}_x+\hat{L}_x[\hat{L}_x,\hat{L}_x]$, но $[\hat{L}_x,\hat{L}_x]=0$, понеже всеки оператор комутира сам със себе си, следователно

(8^А) $[\hat{L}_x^{\,2},\hat{L}_x]=0$.

(7^Б) $[\hat{L}_y^{\,2},\hat{L}_x]=[\hat{L}_y,\hat{L}_x]\hat{L}_y+\hat{L}_y[\hat{L}_y,\hat{L}_x]$.

Но в подусловие (а) бе доказано, че $[\hat{L}_x,\hat{L}_y]=i\hbar\,\hat{L}_z$, следователно $[\hat{L}_y,\hat{L}_x]=-i\hbar\,\hat{L}_z$ и (7^Б) добива вида

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

И накрая

(7^В) $[\hat{L}_z^{\,2},\hat{L}_x]=[\hat{L}_z,\hat{L}_x]\hat{L}_z+\hat{L}_z[\hat{L}_z,\hat{L}_x]$.

И тук, съгласно доказано в подусловие съотношение, имаме $[\hat{L}_z,\hat{L}_x]=i\hbar\,\hat{L}_y$, следователно

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

Накрая заместваме (8^А), (8^Б) и (8^В) в (6), и получаваме

(9) $[\hat{\vec{L}}^2,\hat{L}_x]=[\hat{L}_x^{\,2},\hat{L}_x]+[\hat{L}_y^{\,2},\hat{L}_x]+[\hat{L}_z^{\,2},\hat{L}_x]=0-i\hbar\,(\hat{L}_z\hat{L}_y+\hat{L}_y\hat{L}_z)+i\hbar\,(\hat{L}_y\hat{L}_z+\hat{L}_z\hat{L}_y)=0$,

к.т.д.

По абсолютно същите начини се доказва, че $[\hat{\vec{L}}^2,\hat{L}_y]=0$ и $[\hat{\vec{L}}^2,\hat{L}_z]=0$.

Извод: Щом операторът $\hat{\vec{L}}^2$ и коя да е проекция ($\hat{L}_x,\hat{L}_y,\hat{L}_z$) на оператора на момента на импулса комутират (*т.е. имат комутатор* $=0$), то те имат обща система собствени функции и в състояние(я), описвано(и) с общите им собствени функции могат **едновременно** и **точно** да бъдат измерени.

Задача ❼: Да се докажат комутационните съотношения:

а) $[\hat{L}_i,\hat{p}_k]=i\hbar\,\varepsilon_{ikn}\,\hat{p}_n$;

б) $[\hat{r},\hat{p}^2]=2i\hbar\,\hat{p}$.

Решения:

а) По дефиниция:

(1) $\hat{L}=\hat{r}\times\hat{p}=-i\hbar\,\hat{r}\times\nabla$, следователно

(2) $\hat{L}_i=-i\hbar(-\varepsilon_{\min}x_m\nabla_n)=i\hbar\,\varepsilon_{\min}x_m\dfrac{\partial}{\partial x_n}$, и

(3) $\hat{p}=-i\hbar\nabla$, следователно

(4) $\hat{p}_k=-i\hbar\nabla_k=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x_k}$.

Тогава комутаторът

(5) $[\hat{L}_i,\hat{p}_k]\psi=\hat{L}_i\hat{p}_k\,\psi-\hat{p}_k\,\hat{L}_i\,\psi=\hat{K}_1\,\psi-\hat{K}_2\,\psi\equiv(\hat{K}_1-\hat{K}_2)\psi$,

където (*за удобство*) сме въвели операторите

(6^А) $\hat{K}_1\,\psi=\hat{L}_i\hat{p}_k\,\psi=i\hbar\,\varepsilon_{\min}x_m\dfrac{\partial}{\partial x_n}\left(-i\hbar\dfrac{\partial\psi}{\partial x_k}\right)=\hbar^2\varepsilon_{\min}x_m\dfrac{\partial}{\partial x_n}\left(\dfrac{\partial\psi}{\partial x_k}\right)=\hbar^2\varepsilon_{\min}x_m\dfrac{\partial^2\psi}{\partial x_k\partial x_n}$, и

(6[Б]) $\hat{K}_2\psi = \hat{p}_k\hat{L}_i\psi = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x_k}\left(i\hbar\varepsilon_{\min}x_m\dfrac{\partial\psi}{\partial x_n}\right) = \hbar^2\varepsilon_{\min}\dfrac{\partial}{\partial x_k}\left(x_m\dfrac{\partial\psi}{\partial x_n}\right) =$

$$= \hbar^2\varepsilon_{\min}\left(\frac{\partial x_m}{\partial x_k}\frac{\partial\psi}{\partial x_n} + x_m\frac{\partial^2\psi}{\partial x_n\partial x_k}\right) = \hbar^2\varepsilon_{\min}\delta_{mk}\frac{\partial\psi}{\partial x_n} + \hbar^2\varepsilon_{\min}x_m\frac{\partial^2\psi}{\partial x_n\partial x_k}.$$

Ако заместим (6[А]) и (6[Б]) в (5), получаваме

(7) $[\hat{L}_i, \hat{p}_k]\psi = (\hat{K}_1 - \hat{K}_2)\psi = \hbar^2\varepsilon_{\min}x_m\dfrac{\partial^2\psi}{\partial x_k\partial x_n} - \hbar^2\varepsilon_{\min}\delta_{mk}\dfrac{\partial\psi}{\partial x_n} - \hbar^2\varepsilon_{\min}x_m\dfrac{\partial^2\psi}{\partial x_n\partial x_k}.$

Тук следва да отчетем, че смесените производни $\dfrac{\partial^2\psi}{\partial x_k\partial x_n}$ и $\dfrac{\partial^2\psi}{\partial x_n\partial x_k}$ са равни, което означава, че

(8) $[\hat{L}_i, \hat{p}_k]\psi = -\hbar^2\varepsilon_{\min}\delta_{mk}\dfrac{\partial\psi}{\partial x_n} = -\hbar^2\varepsilon_{kin}\dfrac{\partial\psi}{\partial x_n} = i\hbar(-\varepsilon_{kin})\left(-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x_n}\right)\psi =$

$= i\hbar\,\varepsilon_{ikn}\,\hat{p}_n\psi$, к.т.д.

Коментар: тези два оператора комутират само ако проекциите им са едноименни, т.е. ако $i = k$, защото тогава $\varepsilon_{ikn} \equiv 0$.

б) за определянето на комутатора $[\hat{r}, \hat{p}^2]$ използваме следните комутатори, определени вече в зад. 5[а], където доказахме, че

(9) $[\hat{x}, \Delta] = -2\dfrac{\partial}{\partial x}$, $[\hat{y}, \Delta] = -2\dfrac{\partial}{\partial y}$ и $[\hat{z}, \Delta] = -2\dfrac{\partial}{\partial z}$.

Следва да отчетем още, че

(10) $\hat{p}^2 = (-i\hbar\nabla)^2 = -\hbar^2\Delta$,

Вследствие на което можем да запишем, че

$$[\hat{x}, \hat{p}^2] = [\hat{x}, (-\hbar^2\Delta)] \equiv -\hbar^2[\hat{x}, \Delta] = (-\hbar^2)\left(-2\frac{\partial}{\partial x}\right) = -2\hbar\left(-\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\frac{i}{i} =$$

$$= -\frac{2\hbar}{i}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) == -\frac{2\hbar}{i}\hat{p}_x = 2i\hbar\,\hat{p}_x \text{ т.е.}$$

(11) $[\hat{x}, \hat{p}^2] = 2i\hbar\,\hat{p}_x$.

По същия начин може да бъде доказано, че

(12) $[\hat{y}, \hat{p}^2] = 2i\hbar\,\hat{p}_y$ и (13) $[\hat{z}, \hat{p}^2] = 2i\hbar\,\hat{p}_z$.

Щом всяка една от компонентите на трикомпонентният оператор на координатата $\hat{r}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ и еднокомпонентният („скаларен”) оператор $\hat{p}^2$ имат комутатор, изразяващ се чрез съответна проекция на оператора на импулса $\hat{p}(\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$, то очевидно $[\hat{r}, \hat{p}^2] = 2i\hbar\,\hat{p}$, к.т.д.

Задача ❽: Да се представи операторът на квадрата на момента на импулса в сферични координати.

Решение: както е известно единичните вектори $\vec{e}_i$ на ортогонална сферична КС (r, θ, φ)

$$\left| \begin{array}{l} x = r.\sin\theta.\cos\varphi \\ y = r.\sin\theta.\sin\varphi \\ z = r.\cos\theta \end{array} \right.$$

се изразяват посредством коефициентите й на Ламе $H_i = \left|\dfrac{\partial \vec{r}}{\partial q_i}\right|$ посредством съотношенията $\vec{e}_i = \dfrac{1}{H_i}\dfrac{\partial \vec{r}}{\partial q_i}$. За сферична КС коефициентите на Ламе са $\boxed{H_r = 1}$, $\boxed{H_\theta = r}$ и $\boxed{H_\varphi = r.\sin\theta}$, а единичните й вектори са съответно:

$$(1)\qquad \left| \begin{array}{l} \vec{e}_r = \sin\theta\cos\varphi\,\vec{i} + \sin\theta\sin\varphi\,\vec{j} + \cos\theta\,\vec{k} \\ \vec{e}_\theta = \cos\theta\cos\varphi\,\vec{i} + \cos\theta\sin\varphi\,\vec{j} - \sin\theta\,\vec{k}\,. \\ \vec{e}_\varphi = -\sin\varphi\,\vec{i} + \cos\varphi\,\vec{j} \end{array} \right.$$

Както е известно тези единични вектори са взаимно ортогонални, т.е. скаларното произведение на кои да е два от тях е

(2) $\vec{e}_i.\vec{e}_j = \delta_{ij}$, за $i, j = r, \theta, \varphi$ съответно.

Радиус-векторът на точка в сферични координати се представя във вида

(3) $\vec{r} = r.\sin\theta\cos\varphi\,\vec{i} + r.\sin\theta\sin\varphi\,\vec{j} + r.\cos\theta\,\vec{k} \equiv r.\vec{e}_r$,

а градиентът в сферични координати се дава с

$$(4)\qquad grad\,\psi = \frac{1}{H_r}\frac{\partial\psi}{\partial r}\vec{e}_r + \frac{1}{H_\theta}\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\vec{e}_\theta + \frac{1}{H_\varphi}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\vec{e}_\varphi =$$

$$= \left(\frac{\partial}{\partial r}\vec{e}_r + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\vec{e}_\theta + \frac{1}{r.\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\vec{e}_\varphi\right)\psi \equiv \nabla\psi\,.$$

Следователно набла-операторът в сферични координати е

$$(5)\qquad \nabla = \frac{\partial}{\partial r}\vec{e}_r + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\vec{e}_\theta + \frac{1}{r.\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\vec{e}_\varphi\,.$$

С помощта на (3) и (5) може да бъде представен в сферични координати и операторът на момента на импулса

$$(6)\qquad \hat{\vec{L}} \equiv \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} = -i\hbar\,(\vec{r}\times\nabla) = \left| \begin{array}{ccc} \vec{e}_r & \vec{e}_\theta & \vec{e}_\varphi \\ r & 0 & 0 \\ \dfrac{\partial}{\partial r} & \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial}{\partial\theta} & \dfrac{1}{r.\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\varphi} \end{array} \right| = -i\hbar\left(\vec{e}_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\vec{e}_\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right).$$

Вижда се наличието на ъглова зависимост (*зависимост от ъглите* θ, φ) и липсата на радиална зависимост (*зависимост от* r). Нека определим квадрата на оператора (6)

$$(7)\qquad \hat{\vec{L}}^2 = \hat{L}\hat{L} = (-i\hbar)^2\left(\vec{e}_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\vec{e}_\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\left(\vec{e}_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\vec{e}_\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) =$$

$$= -\hbar^2\left[\vec{e}_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\vec{e}_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\vec{e}_\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) - \frac{\vec{e}_\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\vec{e}_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\vec{e}_\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\right] =$$

$$= -\hbar^2\left[\vec{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial\theta}\left(\vec{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial\theta}\right) - \vec{e}_\varphi . \frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{\vec{e}_\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) - \frac{\vec{e}_\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\vec{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{\vec{e}_\theta}{\sin\theta}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi}\frac{\vec{e}_\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\right] =$$

$$= -\hbar^2\left[\vec{e}_\varphi \frac{\partial\vec{e}_\varphi}{\partial\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \vec{e}_\varphi.\vec{e}_\varphi \frac{\partial^2}{\partial\theta^2} - \vec{e}_\varphi . \frac{\partial\vec{e}_\theta}{\partial\theta}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} - \vec{e}_\varphi.\vec{e}_\theta \frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{1}{\sin\theta}\right)\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{\vec{e}_\varphi.\vec{e}_\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) -\right.$$

$$\left. - \frac{\vec{e}_\theta}{\sin\theta}\frac{\partial\vec{e}_\varphi}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\vec{e}_\theta.\vec{e}_\varphi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{\vec{e}_\theta}{\sin\theta}\frac{\partial\vec{e}_\theta}{\partial\varphi}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\vec{e}_\theta.\vec{e}_\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\frac{1}{\sin\theta}\right)\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\vec{e}_\theta.\vec{e}_\theta}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right].$$

В горните записи следва да се отчетат съотношенията за ортогоналност (2), а именно

(8) $\quad \vec{e}_\theta.\vec{e}_\theta = 1, \quad \vec{e}_\theta.\vec{e}_\varphi = 0$ и $\vec{e}_\varphi.\vec{e}_\varphi = 1.$

Освен това присъстват и производни по ъгловите променливи от единичните вектори на сферичната КС. За тяхното определяне използваме представянията (1):

$$\frac{\partial\vec{e}_\theta}{\partial\theta} = \frac{\partial}{\partial\theta}[\cos\theta\cos\varphi\,\vec{i} + \cos\theta\sin\varphi\,\vec{j} - \sin\theta\vec{k}] = -\sin\theta\cos\varphi\,\vec{i} - \sin\theta\sin\varphi\,\vec{j} - \cos\theta\vec{k}\,,$$

и очевидно

$$(9^{А})\quad \frac{\partial\vec{e}_\theta}{\partial\theta} = -[\sin\theta\cos\varphi\,\vec{i} + \sin\theta\sin\varphi\,\vec{j} + \cos\theta\vec{k}] = -\vec{e}_r\,,$$

следователно

$$(9^{Б})\quad \vec{e}_\varphi.\frac{\partial\vec{e}_\theta}{\partial\theta} = -\vec{e}_\varphi.\vec{e}_r \equiv 0\,.$$

Аналогично

$$\frac{\partial\vec{e}_\theta}{\partial\varphi} = \frac{\partial}{\partial\varphi}[\cos\theta\cos\varphi\,\vec{i} + \cos\theta\sin\varphi\,\vec{j} - \sin\theta\vec{k}] = \cos\theta(-\sin\varphi)\vec{i} + \cos\theta(\cos\varphi)\,\vec{j} = \cos\theta\vec{e}_\varphi\,,$$

следователно

$$(10)\quad \vec{e}_\theta.\frac{\partial\vec{e}_\theta}{\partial\varphi} = \cos\theta\vec{e}_\theta.\vec{e}_\varphi \equiv 0\,.$$

Накрая определяме и

$$(11^{А})\quad \frac{\partial\vec{e}_\varphi}{\partial\varphi} = \frac{\partial}{\partial\varphi}[-\sin\varphi\,\vec{i} + \cos\varphi\,\vec{j}] = -\cos\varphi\,\vec{i} - \sin\varphi\,\vec{j}\,.$$

Понеже резултатът от диференцирането следва да се представи чрез линейна комбинация от единичните вектори на **сферичната КС**, правим следното. Забелязваме, че:

$$\sin\theta.\vec{e}_r = \sin\theta[\sin\theta\cos\varphi\,\vec{i} + \sin\theta\sin\varphi\,\vec{j} + \cos\theta\vec{k}] = \sin^2\theta\cos\varphi\,\vec{i} + \sin^2\theta\sin\varphi\,\vec{j} + \sin\theta\cos\theta\vec{k}$$

$$\cos\theta.\vec{e}_\theta = \cos\theta[\cos\theta\cos\varphi\,\vec{i} + \cos\theta\sin\varphi\,\vec{j} - \sin\theta\vec{k}] = \cos^2\theta\cos\varphi\,\vec{i} + \cos^2\theta\sin\varphi\,\vec{j} - \sin\theta\cos\theta.\vec{k}$$

Очевидно сборът на горните две равенства дава точно ($\cos\varphi\,\vec{i} + \sin\varphi\,\vec{j}$), следователно можем да представим ($11^{А}$) във вида

$$(11^{Б})\quad \frac{\partial\vec{e}_\varphi}{\partial\varphi} = -(\cos\varphi\,\vec{i} + \sin\varphi\,\vec{j}) = -[\sin\theta.\vec{e}_r + \cos\theta.\vec{e}_\theta],$$

откъдето следва

$$(11^{В})\quad \vec{e}_\theta.\frac{\partial\vec{e}_\varphi}{\partial\varphi} = -\vec{e}_\theta.[\sin\theta.\vec{e}_r + \cos\theta.\vec{e}_\theta] = -\sin\theta.\vec{e}_\theta.\vec{e}_r - \cos\theta.\vec{e}_\theta.\vec{e}_\theta \equiv -\cos\theta\,.$$

Остана да заместим (8), ($9^{Б}$), (10) и ($11^{В}$) в (7), след което ще получим

(12) $$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right].$$

Ако в (12) вземем под внимание, че

(13) $$\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right),$$

получаваме

(14) $$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right].$$

Задача ❾: Докажете, че операторите $\hat{p}^2$ и $\hat{L}^2$ комутират.

Решение: както е известно

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

а в предната задача ❽ установихме, че

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

където е използвано, че

$\Delta = \Delta_r + \frac{1}{r^2}\Delta_{\theta,\varphi}$ - оператор на Лаплас, като:

(3) $\Delta_r = \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)$ - радиална част на оператора на Лаплас,

(4) $\Delta_{\theta,\varphi} = \frac{1}{\sin\theta}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$ - „ъглова” част на оператора на Лаплас.

От $(1)\div(4)$ следва, че комутаторът

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

Нека разгледаме поотделно комутаторите в (5):

☞ Комутаторът $[\Delta_r, \Delta_{\theta,\varphi}] = \Delta_r\Delta_{\theta,\varphi} - \Delta_{\theta,\varphi}\Delta_r \equiv 0$, понеже Δ_r е диференциален оператор по радиалната координата r, докато $\Delta_{\theta,\varphi}$ е диференциален оператор по „ъгловите” променливи θ и φ, следователно резултатът от тяхното последователно действие върху вълнова функция $\psi(r,\theta,\varphi)$ не зависи от реда на това действие (*операторите имат различни приложни полета*), или с други думи

(6) $$[\Delta_r, \Delta_{\theta,\varphi}] = 0.$$

☞ Вторият от комутаторите $[\Delta_{\theta,\varphi}, \Delta_{\theta,\varphi}]$ в (5) е също равен на нула, понеже **всеки оператор комутира сам със себе си**, т.е.

(7) $$[\Delta_{\theta,\varphi}, \Delta_{\theta,\varphi}] = 0.$$

Отчитайки (6) и (7) в (5), получаваме

(8) $[\hat{p}^2, \hat{L}^2] = 0$, к.т.д.

Задача ❿: Да се представи в сферични координати операторът на проекцията $\hat{L}_z$ на момента на импулса.

Решение: връзката между декартови и сферични координати се дава със съотношенията

(1) $\quad x = r\sin\theta\cos\varphi, \quad y = r\sin\theta\sin\varphi, \quad z = r\cos\theta.$

Нека представим оператора $\boxed{\dfrac{\partial}{\partial\varphi}}$ в декартови координати. За целта използваме, че ако $F(x,y,z)$ е произволна диференцируема функция, то

(2) $\quad \dfrac{\partial F}{\partial\varphi} = \dfrac{\partial F}{\partial x}\dfrac{\partial x}{\partial\varphi} + \dfrac{\partial F}{\partial y}\dfrac{\partial y}{\partial\varphi} + \dfrac{\partial F}{\partial z}\dfrac{\partial z}{\partial\varphi}$, т.е.

(3) $\quad \dfrac{\partial}{\partial\varphi} = \dfrac{\partial x}{\partial\varphi}\dfrac{\partial}{\partial x} + \dfrac{\partial y}{\partial\varphi}\dfrac{\partial}{\partial y} + \dfrac{\partial z}{\partial\varphi}\dfrac{\partial}{\partial z}.$

Производните $\dfrac{\partial x}{\partial\varphi}$, $\dfrac{\partial y}{\partial\varphi}$ и $\dfrac{\partial z}{\partial\varphi}$ определяме от (1)

$$\frac{\partial x}{\partial\varphi} = -r\sin\theta\sin\varphi = -y;$$

$$\frac{\partial y}{\partial\varphi} = r\sin\theta\cos\varphi = x;$$

$$\frac{\partial z}{\partial\varphi} = 0.$$

Ако така намерените производни заместим в (3), ще получим

(4) $\quad \dfrac{\partial}{\partial\varphi} = -y\dfrac{\partial}{\partial x} + x\dfrac{\partial}{\partial y} + 0.\dfrac{\partial}{\partial z} = x\dfrac{\partial}{\partial y} - y\dfrac{\partial}{\partial x}.$

Оказва се, че представен в декартови координати, операторът $\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$ съвпада (с точност до константа) с оператора $\hat{L}_z$. Действително, в декартови координати

(5) $\quad \hat{L}_z = -i\hbar\left(x\dfrac{\partial}{\partial y} - y\dfrac{\partial}{\partial x}\right).$

От сравняването на (4) и (5) заключаваме, че

(6) $\quad \hat{L}_z = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\varphi},$

което е търсеното представяне на оператора $\hat{L}_z$ в сферични координати.

Задача 11: Да се разложи (*развие*) в ред по степените на λ (*предполагайки, че λ е малък параметър*), операторната функция

(1) $\quad \dfrac{1}{(\hat{A} - \lambda\hat{B})} = \displaystyle\sum_{n=1}^{\infty}\hat{L}_n\lambda^n,$

т.е. да се определят коефициентите (*оператори*) $\hat{L}_n$ в редовото й развитие.

Решение: Представяме реда (1) в явен вид като безкрайна сума от вида

$$(2)\qquad \frac{1}{(\hat{A}-\lambda\hat{B})}=\hat{L}_0+\hat{L}_1\lambda+\hat{L}_2.\lambda^2+\ldots..+\hat{L}_n.\lambda^n.$$

Това е операторно равенство, което можем да умножим **отляво** с $(\hat{A}-\lambda\hat{B})$. Така получаваме следното (ново) операторно равенство:

$$(3)\qquad 1=(\hat{A}-\lambda\hat{B})\hat{L}_0+(\hat{A}-\lambda\hat{B})\hat{L}_1\lambda+(\hat{A}-\lambda\hat{B})\hat{L}_2.\lambda^2+\ldots..+(\hat{A}-\lambda\hat{B})\hat{L}_n.\lambda^n,$$ т.е.

$$1+0.\lambda+0.\lambda^2+\ldots+0.\lambda^n=\hat{A}\hat{L}_0+(\hat{A}\hat{L}_1-\hat{B}\hat{L}_0)\lambda+(\hat{A}\hat{L}_2-\hat{B}\hat{L}_1).\lambda^2+\ldots..+(\hat{A}\hat{L}_n-\hat{B}\hat{L}_{n-1}).\lambda^n.$$

От приравняването на коефициентите пред еднаквите степени на λ от двете страни на горното равенство получаваме следните уравнения

$$(4)\quad \left|\begin{array}{l}\hat{A}\hat{L}_0=1\\ (\hat{A}\hat{L}_1-\hat{B}\hat{L}_0)=0\\ (\hat{A}\hat{L}_2-\hat{B}\hat{L}_1)=0\\ \ldots\ldots\ldots\ldots\\ (\hat{A}\hat{L}_n-\hat{B}\hat{L}_{n-1})=0\end{array}\right. \Rightarrow \left|\begin{array}{l}\hat{L}_0=\hat{A}^{-1}\\ \hat{A}\hat{L}_1=\hat{B}\hat{L}_0\\ \hat{A}\hat{L}_2=\hat{B}\hat{L}_1\\ \ldots\ldots\ldots\ldots\\ \hat{A}\hat{L}_n=\hat{B}\hat{L}_{n-1}\end{array}\right. \Rightarrow \left|\begin{array}{l}\hat{L}_0=\hat{A}^{-1}\\ \hat{A}^{-1}\hat{A}\hat{L}_1=\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\\ \hat{A}^{-1}\hat{A}\hat{L}_2=\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{L}_1\\ \ldots\ldots\ldots\ldots\\ \hat{A}^{-1}\hat{A}\hat{L}_n=\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{L}_{n-1}\end{array}\right. \Rightarrow$$

$$\Rightarrow\quad \left|\begin{array}{l}\hat{L}_0=\hat{A}^{-1}\\ \hat{L}_1=\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\\ \hat{L}_2=\hat{A}^{-1}\hat{B}(\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1})\\ \ldots\ldots\ldots\ldots\\ \hat{L}_n=\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{L}_{n-1}\end{array}\right.$$

Така стъпка по стъпка, отчитайки че $\hat{A}^{-1}\hat{A}=1$, можем да определим всички коефициенти-оператори $\hat{L}_n$ в редовото развитие (2).

Задача 12: Да се получат комутационните съотношения за проекциите на електронния спин S_x, S_y и S_z.

Задача 13: Даден е хармоничен осцилатор с маса m. Въвеждаме операторите:

$$\hat{P}=\frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}\hat{p}\qquad \text{и}\qquad Q=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x},$$

където $\hat{p}$ и $\hat{x}$ са съответно операторите на импулса и на координатата на осцилатора. Да се определят комутационните съотношения за операторите

$$\hat{a}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{Q}+i\hat{P}\right)\qquad \text{и}\qquad \hat{a}^+=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{Q}-i\hat{P}\right).$$

Тема : Собствени стойности и собствени функции на оператори

Теоретичен минимум: уравнението за собствените стойности и собствените функции на оператор $\hat{L}$ с непрекъснат спектър има вида

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

където ψ - собствени функции, λ - собствени стойности.

Условието за нормировка на вълновата функция на оператор с непрекъснат спектър се изразява чрез δ-функция на Дирак

$$\int\limits_V \psi^*_{\lambda^/}(\vec{r})\psi_\lambda(\vec{r})\,dv = \delta(\lambda^/ - \lambda) ,$$

където $\psi_{\lambda^/}(\vec{r})$ и $\psi_\lambda(\vec{r})$ са вълнови функции, съответстващи на собствени стойности $\lambda^/$ и λ съответно.

Уравнението за собствените стойности и собствените функции на оператор $\hat{L}$ с дискретен спектър има вида

$$\hat{H}\psi_n = \lambda_n\psi_n ,$$

където ψ_n - собствени функции, λ_n - дискретен набор от собствени стойности.

Условието за нормировка на вълновата функция на оператор с дискретен спектър се изразява чрез символите на Кронекер

$$\int\limits_V \psi^*_m(\vec{r})\psi_n(\vec{r})\,dv = \delta_{mn} ,$$

където $\psi_m(\vec{r})$ и $\psi_n(\vec{r})$ са вълнови функции, съответстващи на собствени стойности λ_m и λ_n съответно.

Задача ❶: Определете собствените стойности и собствените функции на операторите:

а) $\hat{L} = \dfrac{d}{dx}$; б) $\hat{L} = i\dfrac{d}{dx}$;

в) $\hat{L} = \dfrac{d}{d\varphi}$; г) $\hat{L} = x + \dfrac{d}{dx}$.

Решения:

а) уравнението за собствените стойности и собствените функции на оператора $\hat{L} = \dfrac{d}{dx}$ има вида

$$\frac{d\psi}{dx} = \lambda\psi , \tag{1}$$

където λ са собствените стойности на оператора, а ψ - собствените функции. Уравнение (1) е уравнение с разделящи се променливи, и неговото решение се получава елементарно

$$\frac{d\psi}{\psi} = \lambda\,dx \quad \Rightarrow \quad \ln\psi = \lambda\,x + \ln C = \ln e^{\lambda x} + \ln C = \ln C.e^{\lambda x},$$ откъдето

$$\psi(x) = C.e^{\lambda x} . \tag{2}$$

Върху функцията (2) се налагат следните стандартни за вълнова функция изисквания да е:

а) еднозначна;

б) ограничена по модул при $x \to \pm\infty$, т.е. $\lim\limits_{x\to\pm\infty} \psi(x) = 0$;

в) да бъде дефинирана и непрекъсната за всички стойности на аргумента $-\infty < x < \infty$.

Изискване (б) е изпълнено само тогава, когато

(3) $\lambda = i\beta$, където $\beta \in \Re$, понеже тогава $\left|e^{\lambda x}\right| \equiv \left|e^{i\beta x}\right| = 1$.

И така, собствените функции на оператора $\hat{L} = \dfrac{d}{dx}$ са

(4) $\psi(x) = C.e^{i\beta x}$,

а спектъра от собствените му стойности $\lambda = i\beta$ е непрекъснат, като тези собствени стойности са чисто комплексни числа.

б) уравнението за собствените стойности и собствените функции на оператора $\hat{L} = i\dfrac{d}{dx}$ има вида

(1) $i\dfrac{d\psi}{dx} = \lambda\psi \qquad \Big| .(-i)$

$\dfrac{d\psi}{\psi} = -i\lambda\, dx \quad \Rightarrow \quad \ln\psi = -i\lambda\, x + \ln C = \ln e^{-i\lambda x} + \ln C = \ln C.e^{-i\lambda x}$, откъдето

(2) $\psi(x) = C.e^{-i\lambda x}$.

Функцията (2) удовлетворява и трите стандартни изисквания за вълнова функция при условие, че $\lambda \in \Re$, понеже тогава $\left|e^{i\lambda x}\right| = 1$. И така, собствените функции на оператора $\hat{L} = i\dfrac{d}{dx}$ са

(3) $\psi(x) = C.e^{i\lambda x}$,

а спектъра от собствените му стойности λ е непрекъснат, като тези собствени стойности са реални числа.

в) уравнението за собствените стойности и собствените функции на оператора $\hat{L} = \dfrac{d}{d\varphi}$ има вида

(1) $\dfrac{d\psi}{d\varphi} = \lambda\psi$

$\dfrac{d\psi}{\psi} = \lambda\, d\varphi \quad \Rightarrow \quad \ln\psi = \lambda\,\varphi + \ln C = \ln e^{\lambda\varphi} + \ln C = \ln C.e^{\lambda\varphi}$, откъдето

(2) $\psi(\varphi) = C.e^{\lambda\varphi}$.

От изискването за еднозначност на собствените функции следва условието

(3) $\psi(\varphi + 2\pi) = \psi(\varphi)$, т.е.

(4) $C.e^{\lambda(\varphi+2\pi)} = C.e^{\lambda\varphi}$, т.е. $e^{\lambda 2\pi} = 1 \equiv e^{\pm im.2\pi}$,

като в горния запис е отчетено, че $e^{\pm im.2\pi} = \cos(m.2\pi) \pm i.\sin(m.2\pi) \equiv \cos(m.2\pi) = 1$ за всяка целочислена стойност на m. От (4) следва, че

(5) $e^{\lambda} = e^{\pm im}$, т.е. $\lambda = \pm i.m$.

Заместваме така намерената стойност на λ в (2), и за собствените вълнови функции получаваме

(6) $\psi(\varphi) = C.e^{\pm im\varphi}$, $m = 0,1,2,\ldots$, или в по-опростен запис

(7) $\psi(\varphi) = C.e^{im\varphi}$, $m = 0, \pm 1, \pm 2,\ldots$

Очевидно спектърът на оператора $\hat{L} = \dfrac{d}{d\varphi}$ е дискретен, защото неговите собствени стойности (чисто имагинерни величини) се дават с дискретната последователност $\lambda = \pm i.m$, $m = 0,1,2,\ldots$

г) уравнението за собствените стойности и собствените функции на оператора $\hat{L} = x + \dfrac{d}{dx}$ има вида

(1) $\left(x + \dfrac{d}{dx}\right)\psi = \lambda\psi$, т.е.

$$x\psi + \frac{d\psi}{dx} = \lambda\psi, \qquad \frac{d\psi}{dx} = (\lambda - x)\psi, \qquad \frac{d\psi}{\psi} = (\lambda - x)\,dx,$$

$\ln\psi = (\lambda.x - \dfrac{x^2}{2}) + \ln C = \ln e^{\lambda.x - \frac{x^2}{2}} + \ln C = \ln C.e^{\lambda.x - \frac{x^2}{2}}$, откъдето

(2) $\psi(x) = C.e^{\lambda.x - \frac{x^2}{2}}$.

Вълновата функция (2) удовлетворява изискванията да е:

а) еднозначна;

б) дефинирана и непрекъсната за всички стойности на аргумента $-\infty < x < \infty$;

в) ограничена по модул при $x \to \pm\infty$, т.е. $\lim\limits_{x\to\pm\infty} \left|\psi(x)\right|^2 = 0$.

Изпълнението на последното от трите условия може да се провери непосредствено. Действително:

☞ при $x > 0$

$\left|\psi(x)\right|^2 = \left|C\right|^2.e^{2\lambda.x - x^2} = \left|C\right|^2.\dfrac{e^{2\lambda.x}}{e^{x^2}} = \left|C\right|^2.\dfrac{(e^{.x})^{2\lambda}}{(e^{.x})^{x}}$, откъдето следва, че при $x \to +\infty$ е изпълнено $\left|\psi(x)\right|^2 \to 0$;

☞ при $x < 0$ използваме, че

$\left|\psi(x)\right|^2 = \left|C\right|^2.e^{2\lambda.x - x^2} = \left|C\right|^2.\dfrac{1}{e^{2\lambda(-.x)+x^2}}$, и понеже $(-x) > 0$, то очевидно и при $x \to -\infty$ е изпълнено $\left|\psi(x)\right|^2 \to 0$.

И така, собствените функции на оператора $\hat{L} = x + \dfrac{d}{dx}$ са $\psi(x) = C.e^{\lambda.x - \frac{x^2}{2}}$, а собствените стойности са реалните числа $\lambda \in \Re$. Очевидно спектърът на оператора е непрекъснат.

Задача ❷: Да се намерят собствените функции на оператора

$$\hat{L} = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} - \frac{2\hbar^2}{x}\frac{d}{dx}.$$

Решение: уравнението за собствените стойности и собствените функции на оператора има вида

(1) $-\hbar^2 \dfrac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \dfrac{2\hbar^2}{x}\dfrac{d\psi(x)}{dx} = \lambda\psi(x)$, или още

(2) $\dfrac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \dfrac{2}{x}\dfrac{d\psi(x)}{dx} + \dfrac{\lambda}{\hbar^2}\psi(x) = 0$

Нека за неговото решаване положим

(3) $\psi(x) = \dfrac{u(x)}{x}$.

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = -\frac{1}{x^2}u(x) + \frac{1}{x}\frac{du(x)}{dx};$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{d}{dx}\left(\frac{d\psi(x)}{dx}\right) = \frac{2}{x^3}u(x) - \frac{1}{x^2}\frac{du(x)}{dx} - \frac{1}{x^2}\frac{du(x)}{dx} + \frac{1}{x}\frac{d^2u(x)}{dx^2}.$$

Заместваме с така намерените производни в (2)

$$\left(\frac{2}{x^3}u(x) - \frac{2}{x^2}\frac{du(x)}{dx} + \frac{1}{x}\frac{d^2u(x)}{dx^2}\right) + \frac{2}{x}\left(-\frac{1}{x^2}u(x) + \frac{1}{x}\frac{du(x)}{dx}\right) + \frac{\lambda}{\hbar^2}\frac{u(x)}{x} = 0,$$

$$\frac{2}{x^3}u(x) - \frac{2}{x^2}\frac{du(x)}{dx} + \frac{1}{x}\frac{d^2u(x)}{dx^2} - \frac{2}{x^3}u(x) + \frac{2}{x^2}\frac{du(x)}{dx} + \frac{\lambda}{\hbar^2}\frac{u(x)}{x} = 0.$$

След съкращения получаваме

(4) $\dfrac{1}{x}\dfrac{d^2u(x)}{dx^2} + \dfrac{\lambda}{\hbar^2}\dfrac{u(x)}{x} = 0 \qquad \big| .x \neq 0$

(5) $\dfrac{d^2u(x)}{dx^2} + \dfrac{\lambda}{\hbar^2}u(x) = 0$, или още $\dfrac{d^2u(x)}{dx^2} + \omega^2 u(x) = 0$,

където е положено $\omega = \sqrt{\dfrac{\lambda}{\hbar^2}} = \dfrac{\sqrt{\lambda}}{\hbar}$. Очевидно (5) е ЛХОДУ от II ред и неговото характеристично уравнение е

(6) $\alpha^2 + \omega^2 = 0$,

корените на което са $\alpha = \pm i\omega$, следователно общото решение на (5) се дава във вида

(7) $u(x) = C_1 e^{i\omega x} + C_2 e^{-i\omega x}$,

а с отчитане на полагането (3) за вълновата функция $\psi(x)$ ще имаме представянето

(8) $\psi(x) = \dfrac{C_1 e^{i\omega x} + C_2 e^{-i\omega x}}{x}$.

Функцията (8) трябва да отговаря на изискванията да е:

а) еднозначна;

б) ограничена при $x \to \pm\infty$;

в) да бъде дефинирана и непрекъсната за всички стойности на аргумента $x \geq 0$, което означава, че при $x = 0$ числителя на (8) трябва също да бъде равен на нула, или

(9) $C_1 + C_2 = 0$,

следователно трябва $C_2 = -C_1$, където означаваме $C_1 = C^*$. С отчитането на (9) представянето (8) добива вида

(10) $\psi(x)=\dfrac{C^{*}e^{i\omega x}-C^{*}e^{-i\omega x}}{x}=2i\dfrac{C^{*}}{x}\dfrac{e^{i\omega x}-e^{-i\omega x}}{2i}=\dfrac{C}{x}\sin(\omega x)$,

където константата $C=2iC^{*}$. Както е известно аналитичното поведение на функцията $\dfrac{\sin(x)}{x}$ при $x=0$ се описва с границата $\lim\limits_{x\to 0}\dfrac{\sin(x)}{x}=1$, откъдето следва, че изискването (в) при $x=0$ е изпълнено.

И така, определените с точност до нормировъчна константа C собствени вълнови функции на оператора $\hat{L}(x)=-\hbar^{2}\dfrac{d^{2}}{dx^{2}}-\dfrac{2\hbar^{2}}{x}\dfrac{d}{dx}$ са

(11) $\psi(x)=\dfrac{C}{x}\sin(\dfrac{\sqrt{\lambda}}{\hbar}x)$.

Задача ❸: Да се намерят нормираните собствени функции на оператора на импулса $\hat{p}_x$. Полученият резултат да се обобщи за оператора $\hat{p}$. Да се определи видът на спектъра.

Решение: уравнението за собствените стойности и собствените функции на оператора $\hat{p}_x$ има вида

(1) $\hat{p}_x\psi=p_x\psi$, т.е.

(2) $-i\hbar\dfrac{\partial\psi}{\partial x}=p_x\psi$,

което лесно се интегрира като уравнение с разделени променливи, и дава

(3) $\psi_{p_x}(x)=C_{p_x}.e^{\frac{i}{\hbar}p_x.x}$ за $-\infty<p_x<\infty$, т.е. **непрекъснат спектър**.

Нормировъчната константа C_{p_x} трябва да бъде избрана по такъв начин, че собствените функции $\psi_{p_x}(x)$ да бъдат нормирани към δ-функция, което е изискване за оператори с непрекъснат спектър, какъвто в случая е операторът p_x.

За целта разглеждаме две собствени функции $\psi_{p_x}(x)$ и $\psi_{p'_x}(x)$, съответстващи на две различни собствени стойности p_x и p'_x на оператора $\hat{p}_x$. Тогава съгласно условието за нормировка трябва да бъде изпълнено

(4) $\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\psi^{*}_{p'_x}(x)\,\psi_{p_x}(x)\,dx=\delta(p'_x-p_x)$, т.е.

(5) $\int\limits_{-\infty}^{+\infty}C^{*}_{p'_x}.e^{-\frac{i}{\hbar}p'_x.x}\;C_{p_x}.e^{\frac{i}{\hbar}p_x.x}\,dx=\delta(p'_x-p_x)$,

$(C^{*}_{p'_x}.C_{p_x}).\int\limits_{-\infty}^{+\infty}e^{i\frac{(p_x-p'_x)}{\hbar}.x}\,dx=\delta(p_x-p'_x)$, или още

$(C^{*}_{p'_x}.C_{p_x}).2\pi\left(\dfrac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}e^{i\frac{(p_x-p'_x)}{\hbar}.x}\,dx\right)=\delta(p_x-p'_x)$.

Съгласно формула от ММФ δ-функцията притежава следното интегрално представяне

(6) $$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\frac{(p_X-p_X^{/})}{\hbar}.x}\,dx=\delta\left(\frac{p_X-p_X^{/}}{\hbar}\right),$$

следователно

(7) $$(C^{*}_{p_X^{/}}.C_{p_X}).\,2\pi\,\delta\left(\frac{p_X-p_X^{/}}{\hbar}\right)=\delta(p_x-p_x^{/}).$$

Но δ-функцията има още свойството

(8) $$\delta(k.\xi)=\frac{\delta(\xi)}{|\,k\,|},$$

което в „нашия”случай при $k=\frac{1}{\hbar}$ дава

(9) $$\delta(k.\xi)=\frac{\delta(\xi)}{\left(\frac{1}{\hbar}\right)}=\hbar.\delta(\xi).$$

С отчитането на релацията (9) формула (7) добива вида

(10) $$(C^{*}_{p_X^{/}}.C_{p_X}).\,2\pi\hbar\,\delta(p_x-p_x^{/})=\delta(p_x-p_x^{/}).$$

„Съкращаваме” δ-функцията от двете страни на горното равенство, което следва да бъде съпроводено още със замяната $p_x^{/}\to p_x$, понеже при $p_x^{/}\neq p_x$ имаме $\delta(p_x-p_x^{/})=0$ и тогава делението с $\delta(p_x-p_x^{/})$ ще бъде математически некоректно. Така (10) добива вида

(11) $(C^{*}_{p_X}.C_{p_X}).\,2\pi\hbar=1$, или още $\left|\,C_{p_X}\,\right|^{2}.\,2\pi\hbar=1$,

откъдето

(12) $$C_{p_x}=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}.$$

След заместване на така намерената стойност на нормировъчната константа в (3), за нормираната вълнова функция на оператора $\hat{p}_x$ получаваме

(13) $$\psi_{p_x}(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}.e^{\frac{i}{\hbar}p_X.x}.$$

От (13) се вижда, че собствените вълнови функции на оператора $\hat{p}_x$ са всъщност плоските вълни на де Бройл. Този резултат не е неочакван, защото състоянията, описвани с вълни на де Бройл са състояния с точно определена стойност на импулса $\hat{p}_x$ (или $\hat{p}$) на частицата, което всъщност е изходен пункт на цялата квантова механика.

Обобщение: по напълно аналогичен начин се доказва, че

(14) $$\psi_{p_y}(y)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}.e^{\frac{i}{\hbar}p_y.y},\text{ и}$$

(15) $$\psi_{p_z}(z)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}.e^{\frac{i}{\hbar}p_Z.z}.$$

Понеже *x, y* и *z* са независими променливи, то „пълната” вълнова функция на оператора на импулса $\hat{p}$ ще се представи във вид на произведение от вълновите функции на неговите проекционни оператори $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$ и $\hat{p}_z$ (*вероятността за 3* *независими събития, т.е. състояния с импулси* p_x, p_y и p_z, *е пропорционална на произведението от техните вероятности*), т.е.

(16) $\psi_p(\vec{r}) \equiv \psi_p(x,y,z) = \psi_{p_X}(x).\psi_{p_y}(y).\psi_{p_Z}(z) =$

$$= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\right)^3 .e^{\frac{i}{\hbar}p_X.x}.e^{\frac{i}{\hbar}p_y.y}.e^{\frac{i}{\hbar}p_Z.z} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}.e^{\frac{i}{\hbar}(p_X.x+p_y.y+p_Z.z)} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}.\vec{r}} .$$

И така, нормираната вълнова функция на оператора на импулса е

(17) $$\psi_p(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}.\vec{r}} .$$

Задача ❹: Да се намерят нормираните собствени функции на оператора на момента на импулса $\hat{L}_z$.

Решение: проекцията $\hat{L}_z$ на оператора на момента на импулса в **сферични координати** е

(1) $$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}.$$

По този начин уравнението за собствените функции и собствените стойности на оператора на момента на импулса

$$\hat{L}_z\,\psi(\varphi) = L_z\,\psi(\varphi)$$

добива вида

(2) $$-i\hbar\frac{\partial\psi(\varphi)}{\partial\varphi} = L_z\,\psi(\varphi).$$

Уравнението (2) е ОДУ с **разделящи се променливи,** и лесно може да бъде интегрирано

$$\frac{d\psi(\varphi)}{\psi(\varphi)} = \frac{L_z}{-i\hbar}d\,\varphi \equiv i\frac{L_z}{\hbar}d\,\varphi, \quad \Rightarrow \quad \ln\psi(\varphi) = i\frac{L_z}{\hbar}\,\varphi + \ln C = \ln e^{i\frac{L_z}{\hbar}\varphi} + \ln C \equiv \ln C\,e^{i\frac{L_z}{\hbar}\varphi},$$

откъдето след антилогаритмуване получаваме

(3) $$\psi(\varphi) = C.e^{i\frac{L_z}{\hbar}\varphi} \qquad \text{за} \qquad 0 \le \varphi \le 2\pi .$$

С уравнение (3) се задават **собствените функции** на оператора на z-проекцията $\hat{L}_z$ на момента на импулса. За да бъдат функциите (3) еднозначни и ограничени (*при* $0 \le \varphi \le 2\pi$), е необходимо да бъде изпълнено условието

(4) $\frac{L_z}{\hbar} = m$, където $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots.$, или още

(5) $L_z = m\hbar$, за $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots.$, където m- **магнитно квантово число**.

С уравнение (5) се задават **собствените стойности** (***спектъра***) на оператора на проекцията $\hat{L}_z$ на момента на импулса. Вижда се, че този спектър е **дискретен**, т.е. той се квантува.

Нека определим нормировъчната константа C в представянето (3) за собствените функции $\psi(\varphi)$ на оператора $\hat{L}_z$. За целта ще приложим **условието за нормировка за оператор с дискретен спектър**, записано във вида

(6) $\int_0^{2\pi} \psi_m^*(\varphi).\psi_n(\varphi)\, d\varphi = \delta_{mn}$, т.е.

$$\int_0^{2\pi} C^*.e^{-im\varphi}.C.e^{in\varphi}\, d\varphi \equiv |C|^2 \int_0^{2\pi} e^{i(n-m)\varphi}\, d\varphi = \delta_{mn},$$

откъдето при $m = n$ получаваме

$$|C|^2 \int_0^{2\pi} d\varphi = 1, \text{ следователно } |C|^2 2\pi = 1 \text{ и } |C| = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$$

Заместваме с така намерената стойност на $|C|$ в (3) и нормираните **собствени функции** на оператора на z-проекцията $\hat{L}_z$ на момента на импулса добиват вида

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

а спектърът от **собствени стойности** е $L_z = m\hbar$, за $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots\ldots$

🕮

Тема: Спрегнатост на оператори. Ермитово-спрегнати и самоспрегнати оператори.

Теоретичен минимум: операторът $\hat{L}^+$ е **ермитово-спрегнат** на оператора $\hat{L}$, ако е изпълнено

(Ф.1) $\int \psi_1^*(x)\, \hat{L}\psi_2(x)\, dx = \int \left(\hat{L}^+\psi_1(x)\right)^* \psi_2(x)\, dx$.

Самоспрегнат (ермитов) е този оператор, за който $\hat{L}^+ \equiv \hat{L}$, т.е.

(Ф.2) $\int \psi_1^*(x)\, \hat{L}\psi_2(x)\, dx = \int \left(\hat{L}\psi_1(x)\right)^* \psi_2(x)\, dx$.

В горните определения (*записи*) $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ са **еднозначни**, **непрекъснати** и **ограничени** функции.

🕮 **Методическо указание:** един стандартен прийом за решаване на задачи от този тип (*доказване на ермитова спрегнатост /самоспрегнатост/ или търсене на ермитово-спрегнат оператор*) е интегриране по части на интегралите в левите (*най-често*) страни на (Ф.1) или (Ф.2), с последващо съпоставяне на получения резултат с десните (*очевидно*) страни на същите равенства.

Друг метод за доказване самоспрегнатост на оператор $\hat{L}$ е да се определи <u>директно</u> неговия ермитово-спрегнат оператор $\hat{L}^+$ и да се покаже, че $\hat{L}^+ \equiv \hat{L}$.

В сила е следната „алгебра” на ермитови оператори:

☞ Сумата от ермитови оператори е **също** ермитов оператор. Пример за това е операторът на Хамилтон $\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}$. Той е ермитов, понеже операторите на кинетичната и потенциалната енергии, чрез сбора на които се представя $\hat{H}$, са ермитови оператори.

☞ Произведението на 2 ермитови оператора, обаче, **не винаги** е ермитов оператор. Действително нека $\hat{A}$ и $\hat{B}$ са два ермитови оператора, т.е. $\hat{A}^+ = \hat{A}$ и $\hat{B}^+ = \hat{B}$. Тогава $[\hat{A}\hat{B}]^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+ = \hat{B}\hat{A}$, обаче в общия случай $\hat{B}\hat{A} \neq \hat{A}\hat{B}$, поради което $[\hat{A}\hat{B}]^+ \neq \hat{A}\hat{B}$, т.е. липсва ермитова спрегнатост. Такава обаче все пак може да има ако двата оператора комутират, т.е. $\hat{B}\hat{A} = \hat{A}\hat{B}$.

Извод: произведението от два ермитови оператора е също ермитов оператор **<u>само ако</u>** двата оператора комутират.

Задача ❶: **а)** Да се докаже, че ако $\hat{L} = C$ е константен оператор, то $\hat{L}^{+} = C^{*}$;

б) Да се докаже, че $(\hat{A}\hat{B})^{+} = \hat{B}^{+}\hat{A}^{+}$.

Доказателство:

а) $\int \psi_1^{*}(x)\; \hat{L}\psi_2(x)\,dx \equiv \int \psi_1^{*}(x) C \psi_2(x)\,dx = \int C\psi_1^{*}(x)\psi_2(x)\,dx = \int (C^{*}\psi_1)^{*}(x)\psi_2(x)\,dx$,

където е използвано, че $C = (C^{*})^{*}$. Същият този интеграл, представен чрез ермитово-спрегнатия оператор $\hat{L}^{+} = C^{+}$ би следвало, съгласно (Ф.1), да бъде

$$\int \psi_1^{*}(x)\; C\psi_2(x)\,dx = \int \left(C^{+}\psi_1(x)\right)^{*} \psi_2(x)\,dx$$

Ако сравним десните страни на горните две равенства, ще имаме

$$\int (C^{*}\psi_1)^{*}(x)\psi_2(x)\,dx \equiv \int \left(C^{+}\psi_1(x)\right)^{*} \psi_2(x)\,dx,$$

където следва, че $C^{+} = C^{*}$, к.т.д.

б) твърдението може да бъде доказано чрез няколкократното прилагане на определението (Ф.1) за ермитово-спрегнат оператор в „*права*" и „*обратна*" посока. Действително, нека означим $\hat{L} = (\hat{A}\hat{B})$, $\hat{L}^{+} = (\hat{A}\hat{B})^{+}$. Ако вземем под внимание очевидното и лесно доказуемо съотношение $(\hat{L}^{+})^{+} = \hat{L}$, и приложим дефиницията (Ф.1) за ермитово-спрегнат оператор спрямо $\boxed{\hat{L}^{+}}$, ще имаме

(1) $\int \psi_1^{*}(x)\; \hat{L}^{+}\psi_2(x)\,dx = \int \left((\hat{L}^{+})^{+}\psi_1(x)\right)^{*} \psi_2(x)\,dx = \int \left(\hat{L}\psi_1(x)\right)^{*} \psi_2(x)\,dx$, т.е.

(2) $\int \psi_1^{*}(x)\; [\hat{A}\hat{B}]^{+}\psi_2(x)\,dx = \int \left([\hat{A}\hat{B}]\psi_1(x)\right)^{*} \psi_2(x)\,dx = \int [\hat{A}\hat{B}]^{*}\, \psi_1(x)^{*}\, \psi_2(x)\,dx =$

$= \int \hat{A}^{*}\hat{B}^{*}\, \psi_1(x)^{*}\, \psi_2(x)\,dx = \int \hat{A}^{*}[\hat{B}^{*}\, \psi_1(x)^{*}]\psi_2(x)\,dx.$

Ако (*само за удобство*) положим $\hat{B}^{*}\,\psi_1(x)^{*} = \varphi_1^{*}$, то горния запис добива вида

$$\int \hat{A}^{*}[\hat{B}^{*}\, \psi_1(x)^{*}]\psi_2(x)\,dx = \int \hat{A}^{*}\varphi_1^{*}\, \psi_2(x)\,dx.$$

От него се вижда, че ако приложим условието за ермитова спрегнатост спрямо оператора $\hat{A}$ в „обратна посока", отчитайки, че ако $\hat{A}^{+}$ е ермитово-спрегнат на $\hat{A}$, то $\hat{A}$ е ермитово-спрегнат на $\hat{A}^{+}$, ще имаме

$$\int \hat{A}^{*}\varphi_1^{*}\, \psi_2(x)\,dx \equiv \int (\hat{A}\varphi_1)^{*}\, \psi_2(x)\,dx = \int \varphi_1^{*}\, \hat{A}^{+}\psi_2(x)\,dx.$$

Ако „възстановим" $\varphi_1^{*} = \hat{B}^{*}\,\psi_1(x)^{*}$, но в замяна на това въведем (*пак за удобство*) $\hat{A}^{+}\psi_2(x) = \varphi_2$, ще имаме по-нататък

$$\int \varphi_1^{*}\, \hat{A}^{+}\psi_2(x)\,dx = \int \hat{B}^{*}\,\psi_1(x)^{*}\, \varphi_2\,dx \equiv \int (\hat{B}\psi_1)^{*}\, \varphi_2\,dx.$$

Тук отново прилагаме условието за ермитова спрегнатост на оператор в „обратна посока", само че този път спрямо оператора $\hat{B}$, като отново отчетем, разбира се, че ако $\hat{B}^{+}$ е ермитово-спрегнат на $\hat{B}$, то $\hat{B}$ е ермитово-спрегнат на $\hat{B}^{+}$. Така получаваме

$$\int (\hat{B}\psi_1)^{*}\, \varphi_2\,dx = \int \psi_1^{*}\, \hat{B}^{+}\, \varphi_2\,dx.$$

Остана да възстановим $\varphi_2 = \hat{A}^{+}\psi_2(x)$, с което финализираме доказателството. Действително, ще получим

$$\int \psi_1(x)^* \,\hat{B}^+ \varphi_2\, dx = \int \psi_1(x)^* \,\hat{B}^+\hat{A}^+ \psi_2(x)\, dx \equiv \int \psi_1(x)^* [\hat{B}^+\hat{A}^+] \psi_2(x)\, dx\,.$$

Ако сравним началото (2) и края на тази (*прекъсвана единствено от текстови пояснения*) верига от равенства, можем да заключим, че

(3) $$\int \psi_1^*(x)\, [\hat{A}\hat{B}]^+ \psi_2(x)\, dx = \int \psi_1(x)^* [\hat{B}^+\hat{A}^+] \psi_2(x)\, dx\,,$$

откъдето следва верността на подлежащото на доказателство равенство.

Задача ❷: Да се <u>провери</u> **самоспрегнатостта** на оператора $\hat{L} = i\dfrac{\partial}{\partial y}$.

Решение:

а) Първи начин: нека означим със $\hat{L}^+ = \left(i\dfrac{\partial}{\partial y}\right)^+$ оператора, спрегнат на $\hat{L} = i\dfrac{\partial}{\partial y}$.

По определение за ермитово-спрегнат оператор в сила е равенството

(1) $$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^* \left(i\frac{\partial}{\partial y}\psi_2 \right) dy = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\left(i\frac{\partial}{\partial y} \right)^+ \psi_1 \right]^* \psi_2\, dy\,,$$

където $\psi_1(y)$ и $\psi_2(y)$ са две еднозначни, непрекъснати и ограничени ($\lim\limits_{y\to\pm\infty} \psi_i(y) = 0$) вълнови функции. Нека разгледаме интеграла в лявата страна на (1)

(2) $$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^* \left(i\frac{\partial}{\partial y}\psi_2 \right) dy = i\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^* \frac{\partial \psi_2}{\partial y}\, dy \equiv i\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*\, d\psi_2 = \text{….. по части …..} =$$

$$= \psi_1^*\psi_2 \Big|_{-\infty}^{+\infty} - i\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_2 d\psi_1^* = -i\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_2 d\psi_1^* = -i\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_2 d\psi_1^* \frac{dy}{dy} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_2 \left(-i\frac{d\psi_1^*}{dy} \right) dy\,,$$

като в горното равенство е отчетено изискването за ограниченост $\lim\limits_{y\to\pm\infty} \psi_i(y) = 0$. Ако използваме, че $-i = i^*$, то (2) добива вида

(3) $$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(i\frac{d\psi_1}{dy} \right)^* \psi_2\, dy = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(i\frac{d}{dy}\psi_1 \right)^* \psi_2\, dy \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\left(i\frac{d}{dy} \right) \psi_1 \right]^* \psi_2\, dy\,.$$

В левите страни на (1) и (3) стои един и същ интеграл, следователно десните им страни са равни. От тяхното сравняване следва равенството

(4) $$\left(i\frac{d}{dy} \right)^+ = i\frac{d}{dy}\,, \qquad \text{т.е.} \qquad \hat{L}^+ = \hat{L}\,.$$

Щом операторът $i\dfrac{d}{dy}$ съвпада с ермитово-спрегнатия си оператор $\left(i\dfrac{d}{dy}\right)^+$, то той е самоспрегнат, к.т.д.

б) Втори начин: в предишната задача ❶ видяхме, че

$$(i)^+ = (i)^* \equiv -i\,.$$

В следващата задача ❸ ще установим, че

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

Тогава по силата на доказаната в зад. ❶ формула $(\hat{A}\hat{B})^{+} = \hat{B}^{+}\hat{A}^{+}$ ще имаме:

$$\left(i\frac{d}{dy}\right)^{+} = \left(\frac{d}{dy}\right)^{+}(i)^{+} = \left(-\frac{d}{dy}\right)(-i) = i\frac{d}{dy}, \qquad \text{к.т.д.}$$

Задача ❸: Да се намери оператор, **ермитово-спрегнат** на оператора $\hat{L} = \dfrac{\partial}{\partial x}$.

Решение: нека означим със $\hat{L}^{+} = \left(\dfrac{\partial}{\partial x}\right)^{+}$ оператора, спрегнат на $\hat{L} = \dfrac{\partial}{\partial x}$. По определение за ермитово-спрегнат оператор в сила е равенството

$$(1) \qquad \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1^*\left(\frac{\partial}{\partial x}\psi_2\right)dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\left[\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^{+}\psi_1\right]^*\psi_2\,dx,$$

където $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ са две еднозначни, непрекъснати и ограничени ($\lim\limits_{x\to\pm\infty}\psi_i(x) = 0$) вълнови функции. Интегралът в лявата страна на (1) е

$$(2) \qquad I = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1^*\left(\frac{\partial}{\partial x}\psi_2\right)dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1^*\frac{\partial\psi_2}{\partial x}dx \equiv \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1^*\,d\psi_2 = \text{….. по части …..} =$$

$$= \psi_1^*\psi_2\Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_2 d\psi_1^* = -\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_2 d\psi_1^* = -\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_2 d\psi_1^*\frac{dx}{dx} = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_2\left(-\frac{d\psi_1^*}{dx}\right)dx,$$

като в горното равенство е отчетено изискването за ограниченост $\lim\limits_{x\to\pm\infty}\psi_i(x) = 0$.

$$(3) \qquad I = \int_{-\infty}^{+\infty}\left(-\frac{d\psi_1}{dx}\right)^*\psi_2\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\left(-\frac{d}{dx}\psi_1\right)^*\psi_2\,dx \equiv \int_{-\infty}^{+\infty}\left[\left(-\frac{d}{dx}\right)\psi_1\right]^*\psi_2\,dx.$$

В левите страни на (1) и (3) стои един и същ интеграл, следователно десните им страни са равни. От тяхното сравняване следва равенството

$$(4) \qquad \left(\frac{d}{dx}\right)^{+} = -\frac{d}{dx}, \qquad \text{т.е.} \qquad \hat{L}^{+} = -\hat{L}.$$

И така ермитово-спрегнатия оператор $\left(\dfrac{d}{dx}\right)^{+}$ на оператора $\dfrac{d}{dx}$ е $\boxed{\left(\dfrac{d}{dx}\right)^{+} = -\dfrac{d}{dx}}$.

Задача ❹: Да се докаже, че операторът на импулса $\hat{p}_x$ е **линеен самоспрегнат оператор**.

Доказателство: Линейността на оператора

$$(1) \qquad \hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

е очевидна, понеже линейността е свойство на диференциални оператори от типа (1). Ще докажем, че $\hat{p}_x$ е и **самоспрегнат оператор**.

Първи начин: За целта е достатъчно да докажем, че

$$(2) \qquad \int\psi_1^*(x)\;\hat{p}_x\psi_2(x)\,dx = \int\left(\hat{p}_x\psi_1(x)\right)^*\psi_2(x)\,dx,$$

където $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ са две произволни вълнови функции, на които се налагат стандартните изисквания да са:

- еднозначни;
- непрекъснати;
- ограничени по модул, т.е. $\lim\limits_{x\to\pm\infty}\left|\psi_i(x)\right|^2 = 0$.

Условието (2) може да бъде записано във вида (*равенството подлежи на доказателство*!)

(3) $$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1^*(x)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi_2(x)\right)dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi_1(x)\right)^*\psi_2(x)\,dx,$$ т.е.

$$-i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1^*(x)\,\frac{\partial\psi_2}{\partial x}\,dx = i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial\psi_1}{\partial x}^*\,\psi_2(x)\,dx,$$ или още

(4) $$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1^*(x)\,\frac{\partial\psi_2}{\partial x}\,dx = -\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial\psi_1}{\partial x}^*\,\psi_2(x)\,dx.$$

Тъй като всички направени дотук преобразования са еквивалентни, то доказателството на (2) се свежда до доказателството на (4). А за да докажем (4), нека разгледаме интеграла в лявата му страна, който може да бъде интегриран по части

(5)

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1^*(x)\,\frac{\partial\psi_2(x)}{\partial x}\,dx \equiv \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1^*(x)\,d\psi_2(x) = \underbrace{\psi_1^*(x)\,\psi_2(x)\Big|_{-\infty}^{+\infty}}_{0} - \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_2(x)\,d\,\psi_1^*(x).$$

С отчитане на условието за ограниченост на вълновите функции първия член в най-дясната страна на горния запис се оказва равен на нула, с което (5) добива вида

(6) $$I = -\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_2(x)\,d\,\psi_1^*(x) \equiv -\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_2(x)\,\frac{d\psi_1^*(x)}{dx}\,dx = -\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\psi_1^*(x)}{dx}\,\psi_2(x)\,dx,$$

а интегралът в дясната страна на (6) е точно интегралът в дясната страна на (4), с което доказателството на (4), а оттам и на (2), е проведено докрай. С това самоспрегнатостта на оператора $\hat{p}_x$ е доказана.

Втори начин: самоспрегнатостта на $\hat{p}_x$ може да бъде доказана елементарно с помощта на резултатите от зад. 1 и зад. 3 от този раздел. В тези задачи доказахме, че:

1) ако C е константен оператор, то $C^+ = C^*$;
2) $(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+$;
3) $\left(\frac{d}{dx}\right)^+ = -\frac{d}{dx}$.

Нека приложим горните 3 резултата за намиране на ермитово-спрегнатия на оператора $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \equiv (-i\hbar)\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)$:

$$\hat{p}^+{}_x = \left[(-i\hbar)\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)\right]^+ = \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^+(-i\hbar)^+ = \left(-\frac{\partial}{\partial x}\right)(-i\hbar)^* = \left(-\frac{\partial}{\partial x}\right)(i\hbar) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \equiv \hat{p}_x.$$

И така, доказахме че $\hat{p}^{+}{}_{x} = \hat{p}_x$, откъдето следва, че (*по определение*) операторът $\hat{p}_x$ е ермитов, к.т.д.

Задача ❺: Да се докаже, че **операторът на Лаплас** Δ е **самоспрегнат оператор**.

Доказателство:

Първи начин: Нека $\psi_1(\vec{r})$ и $\psi_2(\vec{r})$ са две еднозначни, непрекъснати и ограничени (*по модул*) вълнови функции. Условието за самоспрегнатост на Δ е

(1) $$\int_V \psi_1^*(\vec{r})\,\Delta\psi_2(\vec{r})\,dv = \int_V \left(\Delta\psi_1(\vec{r})\right)^* \psi_2(\vec{r})\,dv\,.$$

За да го докажем, достатъчно е да докажем, че е равен на нула интегралът

(2) $$I = \int_V \{\psi_1^*\,\Delta\psi_2 - \left(\Delta\psi_1\right)^*\psi_2\}dv = 0\,.$$

Тук можем да приложим едно лесно доказуемо твърдение от векторния анализ

(3) $$\boxed{\psi_1^*\,\Delta\psi_2 - \left(\Delta\psi_1\right)^*\psi_2 = div[\psi_1^*\,\nabla\psi_2 - \left(\nabla\psi_1\right)^*\psi_2]}\,.$$

***Забележка**: равенство (3) може да бъде доказано, като за дивергенцията в дясната страна се приложи формулата

$$div(u.\vec{V}) = u\,div\vec{V} + \vec{V}.grad\,u\,,$$

където u - скалар, а $\vec{V}$ - вектор. Двукратното прилагане на тази формула, при първото от които се полага $u \to \psi_1^*$, $\vec{V} \to \nabla\psi_2 \equiv grad\;\psi_2$, а при второто се полага $u \to \psi_2$, $\vec{V} \to \nabla\psi_1^* \equiv grad\;\psi_1^*$, води до

$$div[\psi_1^*\,\nabla\psi_2 - \left(\nabla\psi_1\right)^*\psi_2] = \{\psi_1^*\,div(\nabla\psi_2) + (\nabla\psi_1^*).(\nabla\psi_2)\} - \{\psi_2\,div(\nabla\psi_1^*) + (\nabla\psi_2).(\nabla\psi_1^*)\} =$$

$$= \psi_1^*\,\nabla.\nabla\psi_2 + (\nabla\psi_1^*).(\nabla\psi_2) - \psi_2\,\nabla.\nabla\psi_1^* - (\nabla\psi_2).(\nabla\psi_1^*) = \;\ldots\;(\textit{след съкращения})\ldots =$$

$= \psi_1^*\,\Delta\psi_2 - \psi_2\,\Delta\psi_1^* \equiv \psi_1^*\,\Delta\psi_2 - \left(\Delta\psi_1\right)^*\psi_2$, с което представянето (3) е доказано.

След заместване на (3) в (2) получаваме обемния интеграл

(4) $$I = \int_V div[\psi_1^*\,\nabla\psi_2 - \left(\nabla\psi_1\right)^*\psi_2]dv\,,$$

който чрез теоремата на Гаус може да бъде представен чрез повърхнинен интеграл

(5) $$I = \int_V div[\psi_1^*\,\nabla\psi_2 - \left(\nabla\psi_1\right)^*\psi_2]dv = \oint_{S_V}[\psi_1^*\,\nabla\psi_2 - \left(\nabla\psi_1\right)^*\psi_2].d\vec{S} \equiv$$

$$\equiv \oint_{S_V}\psi_1^*\,\nabla\psi_2\;.d\vec{S} - \oint_{S_V}\left(\nabla\psi_1\right)^*\psi_2.d\vec{S}\,,$$

стойността на който се изразява посредством стойностите на вълновите функции ψ_1^* (*а следователно и* ψ_1) и ψ_2 върху повърхността S_V. Понеже областта на интегриране е цялото пространство, то S_V е безкрайна повърхнина S_∞, върху която ограничените (*по условие*) вълнови функции са равни на нула. Това означава, че всеки от двата повърхнинни интеграли в дясната страна на (5) е равен на нула, следователно интегралът (5) е равен на нула, с което се доказва (2), а оттам и самоспрегнатостта на оператора на Лаплас Δ.

Втори начин: самоспрегнатостта на Δ може да бъде доказана елементарно с помощта на резултатите от зад. 1 и зад. 3 от този раздел. В тези задачи доказахме, че:

1) ако C е константен оператор, то $C^+ = C^*$;

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

3) $\left(\dfrac{d}{dx}\right)^{+}=-\dfrac{d}{dx}$.

Нека приложим горните 3 резултата най-напред за намиране на ермитово-спрегнатия на набла-оператора $\nabla(\frac{\partial}{\partial x},\frac{\partial}{\partial y},\frac{\partial}{\partial z})$:

$$\nabla^{+}(\frac{\partial}{\partial x},\frac{\partial}{\partial y},\frac{\partial}{\partial z})=\nabla(\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^{+},\left(\frac{\partial}{\partial y}\right)^{+},\left(\frac{\partial}{\partial z}\right)^{+})=\nabla(-\frac{\partial}{\partial x},-\frac{\partial}{\partial y},-\frac{\partial}{\partial z})=-\nabla(\frac{\partial}{\partial x},\frac{\partial}{\partial y},\frac{\partial}{\partial z}),\text{ т.е. }\boxed{\nabla^{+}=-\nabla}$$

Тогава очевидно

$\Delta^{+}=(\nabla.\nabla)^{+}=\nabla^{+}.\nabla^{+}=(-\nabla).(-\nabla)=\nabla.\nabla\equiv\Delta$.

И така, доказахме че $\Delta^{+}\equiv\Delta$, откъдето следва, че (*по определение*) операторът на Лаплас е ермитов, к.т.д.

Допълнение: с оператора на Лаплас се представят още следните квантовомеханични оператори:

☞ **Оператор на квадрата на импулса:** $\hat{p}^2=-\hbar^2\Delta$;

☞ **Оператор на кинетичната енергия:** $\hat{T}=\dfrac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}=\dfrac{(-i\hbar\nabla)^2}{2m}=-\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta$.

☞ **Оператор на Хамилтон:** $\hat{H}=\hat{T}+\hat{U}=-\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta+U$, където $\hat{U}=U(x,y,z)$ е оператор на потенциалната енергия.

От тези операторни представяния и от доказаната вече самоспрегнатост на оператора на Лаплас следва, че **всеки един от тези три оператора е също самоспрегнат**.

Задача ❻: Да се докаже, че операторът на кинетичната енергия е самоспрегнат оператор.

Доказателство: виж допълнението към предходната задача, но може да се приложи и самостоятелно (*отделно*) доказателство, като напр. следното:

Тъй като $\hat{T}=\dfrac{\hat{p}^2}{2m}$, то с помощта на резултатите от зад. 1 и зад. 3 от този раздел можем да определим ермитово-спрегнатия оператор

$$\hat{T}^{+}=\left[\left(\frac{1}{2m}\right)(\hat{p}^2)\right]^{+}=(\hat{p}^2)^{+}\left(\frac{1}{2m}\right)^{+}=\frac{1}{2m}(\hat{p}^2)^{+}.$$

Но $(\hat{p}^2)^{+}=(\hat{p}\hat{p})^{+}=(\hat{p})^{+}(\hat{p})^{+}=\hat{p}\hat{p}=\hat{p}^2$, следователно

$$\hat{T}^{+}=\frac{1}{2m}(\hat{p}^2)^{+}=\frac{1}{2m}(\hat{p}^2)=\frac{\hat{p}^2}{2m}\equiv\hat{T}.$$

Щом $\hat{T}^{+}\equiv\hat{T}$, то очевидно $\hat{T}$ е ермитов оператор, к.т.д.

Задача ❼: Да се докаже, че операторът на импулса $\hat{p}$ е самоспрегнат оператор.

Доказателство:

Първи начин: операторът на импулса се представя във вида

(1) $\hat{p}=-ih\nabla$.

По дефиниция за самоспрегнатост на оператор трябва да докажем, че за оператора (1) е в сила

(2) $\int_V \psi_1^*\left(-i\hbar\nabla\psi_2\right)dv = \int_V \left(-i\hbar\nabla\psi_1\right)^*\psi_2\,dv$, т.е.

(3) $-i\hbar\int_V \psi_1^*\left(\nabla\psi_2\right)dv = i\hbar\int_V \left(\nabla\psi_1\right)^*\psi_2\,dv$,

където е отчетено, че $i^* = -i$. След съкращаване получаваме, че доказването на самоспрегнатостта на оператора $\hat{p}$ се свежда до доказване на следното равенство

(4) $\int_V \psi_1^*\nabla\psi_2\,dv = -\int_V (\nabla\psi_1^*)\,\psi_2\,dv$

За да докажем (4), с което доказваме (2), ще разгледаме интеграла в лявата страна на (4)

(5) $I = \int_V \psi_1^*\nabla\psi_2\,dv$.

Неговата подинтегрална функция може да се преобразува, ако се използва следното тъждество от векторния анализ

(6) $grad\,(u.v) \equiv \nabla(u.v) = (\nabla u)v + u(\nabla v)$,

от което, при формалната замяна $u \to \psi_1^*$ и $v \to \psi_2$, получаваме

(7) $\nabla(\psi_1^*\psi_2) = (\nabla\psi_1^*)\psi_2 + \psi_1^*(\nabla\psi_2)$.

С помощта на (7) подинтегралната функция на (5) може да бъде представена във вида

(8) $\psi_1^*\nabla\psi_2 = \nabla(\psi_1^*\psi_2) - (\nabla\psi_1^*)\psi_2$.

Заместваме (8) в (5), и получаваме

(9) $I = \int_V \psi_1^*\nabla\psi_2\,dv = \int_V [\nabla(\psi_1^*\psi_2) - (\nabla\psi_1^*)\psi]\,dv = \int_V \nabla(\psi_1^*\psi_2)\,dv - \int_V (\nabla\psi_1^*)\psi\,dv$,

(10) $I = I_0 - \int_V (\nabla\psi_1^*)\psi\,dv$,

където с I_0 е означен интегралът

(11) $I_0 = \int_V \nabla(\psi_1^*\psi_2)\,dv$.

Този обемен интеграл може да бъде изразен чрез повърхнинен интеграл посредством една от интегралните теореми, подобна на теоремата на Гаус. За да я получим, използваме въпросната теорема от векторния анализ в следния операторен вид

(12) $\int_V dv\,\nabla = \oint_{S_V} d\vec{S}$.

Ако с оператора (12) „подействаме” върху скаларна функция (*поле*) u, получаваме

(13) $\int_V dv\,\nabla u = \oint_{S_V} d\vec{S}\,u$, т.е. $\int_V \nabla u\,dv = \oint_{S_V} u\,d\vec{S}$.

Нека приложим (13) спрямо скаларната функция $u = \psi_1^*\psi_2$. Така за I_0 получаваме

(14) $I_0 = \int_V \nabla\psi_1^*\psi\,dv = \oint_{S_V} (\psi_1^*\psi)\,d\vec{S}$.

Областта на интегриране в (14) е <u>цялото пространство</u>, което означава, че тъй като $S_V \equiv S_\infty$, то с отчитане на условието за ограниченост на вълновите функции повърхнинният интеграл в дясната страна на (14) се оказва равен на нула, т.е.

(15) $I_0 = 0$.

След отчитане на този резултат (10) добива вида

(16) $I = -\int\limits_V (\nabla \psi_1^*)\psi \, dv$, или още

(17) $\int\limits_V \psi_1^* \nabla \psi_2 \, dv = -\int\limits_V (\nabla \psi_1^*) \, \psi_2 \, dv$,

което е точно (4). С това доказателството на (4), а следователно и на (2), е завършено, откъдето следва, че операторът на импулса $\hat{p}$ е самоспрегнат оператор.

Втори начин: самоспрегнатостта на $\hat{p}$ може да бъде доказана елементарно и с помощта на резултатите от зад. 1 и зад. 5 от този раздел. В тези задачи доказахме, че:

1) ако C е константен оператор, то $C^+ = C^*$;

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

3) $\nabla^+ = -\nabla$.

Нека приложим горните 3 резултата за намиране на ермитово-спрегнатия на оператора $\hat{p} = -i\hbar\nabla$:

$$\hat{p}^+ = [(-i\hbar)(\nabla)]^+ = (\nabla)^+(-i\hbar)^+ = (-\nabla)(-i\hbar)^* = (-\nabla)(i\hbar) = -i\hbar\nabla \equiv \hat{p}.$$

И така, доказахме че $\hat{p}^+ = \hat{p}$, откъдето следва, че (*по определение*) и операторът $\hat{p}$ е ермитов, к.т.д.

Задача ❽: Да се докаже, че всяка от трите проекции $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$, както и самия оператор $\hat{L}$ на момента на импулса, са самоспрегнати оператори.

Доказателство: ще докажем, че напр. $\hat{L}_x$ е ермитов. За останалите доказателството е идентично.

Първи начин: По определение

(1) $$\hat{L}_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right).$$

За да докажем, че $\hat{L}_x$ е самоспрегнат, трябва да докажем, че

(2) $$\int\limits_V \psi_1^*(\hat{L}_x \psi_2)\, dv = \int\limits_V (\hat{L}_x \psi_1)^* \psi_2 \, dv,$$

където $\psi_1(\vec{r})$ и $\psi_2(\vec{r})$ са еднозначни, непрекъснати и ограничени ($\lim\limits_{x,y,z\to\pm\infty} \psi_i(x,y,z) = 0$) функции. Трябва да докажем равенството

(3) $$\int\limits_V \psi_1^*\left[-i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\psi_2\right] dv = \int\limits_V \left[-i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\psi_1\right]^* \psi_2 \, dv,$$

или още, отчитайки че $i^* = -i$

$$-i\hbar\int\limits_V \psi_1^*\left(y\frac{\partial \psi_2}{\partial z} - z\frac{\partial \psi_2}{\partial y}\right) dv = i\hbar\int\limits_V \left(y\frac{\partial \psi_1^*}{\partial z} - z\frac{\partial \psi_1^*}{\partial y}\right)\psi_2 \, dv.$$

Ако разделим горното равенство на $(-i\hbar)$, след което прехвърлим члена от дясната в лявата страна на равенството, получаваме

(4) $$\int\limits_V \psi_1^*\left(y\frac{\partial \psi_2}{\partial z} - z\frac{\partial \psi_2}{\partial y}\right) dv + \int\limits_V \left(y\frac{\partial \psi_1^*}{\partial z} - z\frac{\partial \psi_1^*}{\partial y}\right)\psi_2 \, dv = 0.$$

Понеже (4) бе получено от (2) като резултат от няколко еквивалентни преобразувания, то доказвайки (4) доказваме всъщност (2). Нека представим (4) във вида

(5) $$\int_V \psi_1^* y \frac{\partial \psi_2}{\partial z} dv - \int_V \psi_1^* z \frac{\partial \psi_2}{\partial y} dv + \int_V y \frac{\partial \psi_1^*}{\partial z} \psi_2 \, dv - \int_V z \frac{\partial \psi_1^*}{\partial y} \psi_2 \, dv = 0,$$ или още

(6) $$\int_V y \left(\psi_1^* \frac{\partial \psi_2}{\partial z} + \frac{\partial \psi_1^*}{\partial z} \psi_2 \right) dv - \int_V z \left(\psi_1^* \frac{\partial \psi_2}{\partial y} + \frac{\partial \psi_1^*}{\partial y} \psi_2 \right) dv = 0.$$

Ако вземем под внимание, че

(7^А) $$\psi_1^* \frac{\partial \psi_2}{\partial z} + \frac{\partial \psi_1^*}{\partial z} \psi_2 = \frac{\partial}{\partial z}(\psi_1^* \psi_2),$$ и (7^Б) $$\psi_1^* \frac{\partial \psi_2}{\partial y} + \frac{\partial \psi_1^*}{\partial y} \psi_2 = \frac{\partial}{\partial y}(\psi_1^* \psi_2),$$

то (6) добива вида

(8) $$\int_V y \frac{\partial}{\partial z}(\psi_1^* \psi_2) \, dv - \int_V z \frac{\partial}{\partial y}(\psi_1^* \psi_2) \, dv = 0.$$

Нека разгледаме първия от двата интеграла в (8)

(9) $$I_1 = \int_V y \frac{\partial}{\partial z}(\psi_1^* \psi_2) \, dv = \int_V y \frac{\partial}{\partial z}(\psi_1^* \psi_2) \, dx\, dy\, dz = \qquad \ldots\ dv = dx.dy.dz\ \ldots$$

$$= \int\int y\, dx\, dy \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial z}(\psi_1^* \psi_2)\ dz \equiv \int\int y\, dx\, dy \int_{-\infty}^{+\infty} d(\psi_1^* \psi_2) = \int\int y\, dx\, dy\ \ (\psi_1^* \psi_2) \Bigg|_{-\infty}^{+\infty} \equiv 0,$$

понеже по условие $\lim\limits_{x,y,z \to \pm\infty} \psi_i(x,y,z) = 0$.

По аналогичен начин се доказва, че и вторият интеграл в (8) е равен на нула, с което всъщност доказваме, че (4), а следователно и (2), са верни равенства. С това доказваме и самоспрегнатостта на оператора $\hat{L}_x$.

Втори начин: самоспрегнатостта на $\hat{L}_x$ може да бъде доказана елементарно с помощта на резултатите от зад. 1 и зад. 3 от този раздел. В тези задачи доказахме, че:

1) ако C е константен оператор, то $C^+ = C^*$;

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

3) $\left(\frac{d}{dx} \right)^+ = -\frac{d}{dx}$.

Едва ли се нуждаят от доказателство и твърденията, че $\hat{x}^+ = \hat{x}$, $\hat{y}^+ = \hat{y}$ и $\hat{z}^+ = \hat{z}$.

Нека приложим горните 4 резултата за намиране на ермитово-спрегнатия на оператора $\hat{L}_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$:

(10) $$\hat{L}_x^{\,+} = \left[(-i\hbar) \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \right]^+ = \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)^+ (-i\hbar)^+ = i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)^+.$$

Нека определим отделно $\left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)^+$:

(11) $$\left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)^+ = \left(y \frac{\partial}{\partial z} \right)^+ - \left(z \frac{\partial}{\partial y} \right)^+ = \left(\frac{\partial}{\partial z} \right)^+ y^+ - \left(\frac{\partial}{\partial y} \right)^+ z^+ = \left(-\frac{\partial}{\partial z} \right) y - \left(-\frac{\partial}{\partial y} \right) z.$$

Заместваме (11) в (10)

(12) $\hat{L}_x^{\,+} = i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)^+ = i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial z}\right) = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \equiv \hat{L}_x$.

И така, доказахме че $\hat{L}_x^{\,+} \equiv \hat{L}_x$, откъдето следва(*по определение*), че операторът $\hat{L}_x$ е ермитов, к.т.д.

Доказателството на самоспрегнатостта на останалите два „проекционни” оператора $\hat{L}_y$ и $\hat{L}_z$ се извършва аналогично по всеки един от разгледаните вече начини.

Накрая може да се направи следния **извод**: Операторът на момента на импулса $\hat{L}$ е съставен (*представим, композиран*) от (*чрез*) своите три проекции (*проекционни оператори*) $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$, самоспрегнатостта на които доказахме току-що. Логическият извод от всичко това е, че „целият” оператор $\hat{L}$ е също **самоспрегнат оператор**.

Доказателството на самоспрегнатостта на оператора $\hat{L}$ може да бъде аргументирано и с помощта на доказаната вече формула $(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+$:

$$\hat{L} = \hat{r}\times\hat{p} \quad\Rightarrow\quad \hat{L}^+ = (\hat{r}\times\hat{p})^+ = -(\hat{p}^+\times\hat{r}^+) = -(\hat{p}\times\hat{r}) = (\hat{r}\times\hat{p}) \equiv \hat{L},$$

т.е. $\hat{L}^+ \equiv \hat{L}$, следователно операторът $\hat{L}$ е самоспрегнат оператор. Принципно важен момент в доказателството е знакът „-„ в горните преобразувания, който се появява (*отчита*) при спрягането, понеже операцията векторно умножение „$\times$”, свързваща двата оператора, е антикомутативна.

Накрая може чрез доказаното вече $\hat{L}^+ \equiv \hat{L}$ и формула $(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+$ да се докаже и самоспрегнатостта на оператора на квадрата на момента на импулса $\hat{L}^2$. Действително

$$(\hat{L}^2)^+ = (\hat{L}\hat{L})^+ = (\hat{L})^+(\hat{L})^+ = (\hat{L})(\hat{L}) = \hat{L}^2,$$

с което самоспрегнатостта на $\hat{L}^2$ е доказана.

Тема: Средни стойности

Теоретичен минимум: **Средна стойност** на физична величина F, описвана в състояние ψ с оператор $\hat{F}$, се определя като

(*) $$\overline{F} \equiv \langle F\rangle = \int \psi^* \hat{F}\psi\, dv,$$

като при това ако $\hat{F}$ е самоспрегнат оператор, то $\overline{F}$ е **реална величина**.

Задача ❶: За частица, състоянието на която се описва с функцията $\psi(x) = A\exp\left(-\frac{x^2}{a^2} + ik_0 x\right)$, да се определят средните стойности на координатата $\langle x\rangle$ и импулса $\langle p\rangle$. Величината A е константа, а k_0 е параметър, имащ размерност $[m^{-1}]$.

Решение:

По определение (*) за средна стойност

(1) $$\langle x\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)[\hat{x}\psi(x)]dx=\int_{-\infty}^{+\infty}A^*\exp\left(-\frac{x^2}{a^2}-ik_0x\right)\left[x\,A\exp\left(-\frac{x^2}{a^2}+ik_0x\right)\right]dx=$$

$$=\int_{-\infty}^{+\infty}(A^*A)\exp\left(-\frac{2x^2}{a^2}\right)x\,dx=|\,A|^2\,\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac{2x^2}{a^2}}dx^2=\frac{A^2}{2}\left(-\frac{a^2}{2}\right)\left(-\frac{2}{a^2}\right)\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac{2x^2}{a^2}}dx^2=$$

$$=-\frac{A^2a^2}{4}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac{2x^2}{a^2}}d\left(-\frac{2x^2}{a^2}\right)=-\frac{A^2a^2}{4}\left[e^{-\infty}-e^{-\infty}\right]\equiv 0$$, следователно

(2) $\langle x\rangle=0$.

За намирането на $\langle p\rangle$ използваме, че операторът на импулса $\hat{p}=-i\hbar\nabla$ в едномерната (*очевидно*) задача, която решаваме, съвпада с $\hat{p}_x=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$, следователно

(3) $$\langle p\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)[\hat{p}_x\,\psi(x)]dx=\int_{-\infty}^{+\infty}A^*\exp\left(-\frac{x^2}{a^2}-ik_0x\right)\left[-i\hbar\,A\frac{\partial}{\partial x}\exp\left(-\frac{x^2}{a^2}+ik_0x\right)\right]dx=$$

$$=-i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}(A^*A)\exp\left(-\frac{x^2}{a^2}-ik_0x\right)\left[\left(-\frac{2x}{a^2}+ik_0\right)\exp\left(-\frac{x^2}{a^2}+ik_0x\right)\right]dx=$$

$$=-i\hbar A^2\int_{-\infty}^{+\infty}\left(-\frac{2x}{a^2}+ik_0\right)\exp\left(-\frac{2x^2}{a^2}\right)dx=i\hbar 2\frac{A^2}{a^2}\int_{-\infty}^{+\infty}x\,e^{-\frac{2x^2}{a^2}}dx-i\hbar\,A^2ik_0\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac{2x^2}{a^2}}dx\,.$$

В първото подусловие на задачата вече решихме $\int_{-\infty}^{+\infty}x\,e^{-\frac{2x^2}{a^2}}dx$ и видяхме, че той е равен на нула. По този начин за средната стойност на импулса се получава представянето

(4) $$\langle p\rangle=-i\hbar\,A^2ik_0\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac{2x^2}{a^2}}dx=\hbar k_0A^2\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac{2x^2}{a^2}}dx=\hbar k_0A^2\,\frac{a}{\sqrt{2}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac{2x^2}{a^2}}d\left(\frac{\sqrt{2}x}{a}\right).$$

Ако положим $\dfrac{\sqrt{2}x}{a}=u$, то (4) добива вида

(5) $$\langle p\rangle=\hbar k_0A^2\,\frac{a}{\sqrt{2}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-u^2}\,d\,u=\hbar k_0A^2\,\frac{a}{\sqrt{2}}\sqrt{\pi}=\sqrt{\frac{\pi}{2}}\hbar k_0A^2a\,,$$

където е взето под внимание, че

(6) $\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-u^2}\,d\,u=\sqrt{\pi}$ - интеграл на Поасон.

И така

(7) $$\langle p\rangle=\sqrt{\frac{\pi}{2}}\hbar k_0A^2a\,.$$

Нека определим константата A от условието за нормировка

(8) $\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)\,\psi(x)\,dx=1$, следователно

$$\int_{-\infty}^{+\infty}A^*\exp\left(-\frac{x^2}{a^2}-ik_0x\right)\,A\exp\left(-\frac{x^2}{a^2}+ik_0x\right)dx=1,$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}(A^*A)\exp\left(-\frac{2x^2}{a^2}\right)dx=1,$$

$$A^2\frac{a}{\sqrt{2}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\left(\frac{\sqrt{2}x}{a}\right)^2}d\left(\frac{\sqrt{2}x}{a}\right)=1, \text{ т.е.}$$

$$\frac{a\,A^2}{\sqrt{2}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-u^2}\,d\,u=1.$$

Ако отново използваме интеграла на Поасон, ще получим

(9) $\dfrac{a\,A^2}{\sqrt{2}}\sqrt{\pi}=1$, т.е. $\sqrt{\dfrac{\pi}{2}}\,a\,A^2=1$,

откъдето нормиращата константа

(10) $A^2=\dfrac{1}{a}\sqrt{\dfrac{2}{\pi}}$.

Заместваме A^2 от (10) в (7) и получаваме

(11) $\langle p\rangle=\sqrt{\dfrac{\pi}{2}}\hbar k_0 a\left(\dfrac{1}{a}\sqrt{\dfrac{2}{\pi}}\right)=\hbar k_0$.

И така

(12) $\langle p\rangle=\hbar k_0$.

Задача ❷: За частица, състоянието на която се описва с функцията $\psi_{p_0}(x)=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ip_0x}$, да се определят средните стойности на енергията $\langle E\rangle$ и импулса $\langle p\rangle$.

Решение: ако представим функцията $\psi_{p_0}(x)$ във вида

(1) $\psi_{p_0}(x)=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}(\hbar p_0)x}\equiv\dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}p.x}$,

където

(2) $p=\hbar p_0$,

то очевидно функцията (1) представлява всъщност нормираната вълнова функция на оператора на импулса $\hat{p}_x=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$. Казаното означава, че нормировъчното условие за функцията (1) е

(3) $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*_{p'}(x)\psi_p(x)\,dx=\delta(p-p')$,

като очевидно при $p'=p$ ще имаме $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*_p(x)\psi_p(x)\,dx=1$.

Нека определим $\langle p\rangle$ и $\langle E\rangle$

а) По определение:

(4) $\displaystyle\langle p\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*_p(x)\,\hat{p}\,\psi_p(x)\,dx=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\frac{i}{\hbar}p.x}(-i\hbar)\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}p.x}\right)dx=$

$$=-\frac{i\hbar}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{i}{h}p.x}\left(\frac{i}{h}p\right)e^{\frac{i}{h}p.x}dx=(-i\hbar)\left(\frac{i}{h}p\right)\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{i}{h}p.x}\ e^{\frac{i}{h}p.x}dx=$$

$$=p\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{i}{h}p.x}\ e^{\frac{i}{h}p.x}dx=p\int_{-\infty}^{\infty}\underbrace{\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\frac{i}{h}p.x}\right)}_{\psi_p^*}\underbrace{\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{h}p.x}\right)}_{\psi_p}dx=$$

$$=p\int_{-\infty}^{\infty}\psi_p^*\psi_p dx=\ \ldots\ \textit{съгласно (3)}\ \ldots\ =p=\hbar p_0.$$

б) По определение:

$$(5)\qquad \langle E\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_p^*(x)\hat{T}\psi_p(x)\,dx=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\frac{i}{h}p.x}(-\frac{\hbar^2}{2m})\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{h}p.x}\right)dx=$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{i}{h}p\right)^2\int_{-\infty}^{\infty}\underbrace{\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\frac{i}{h}p.x}\right)}_{\psi_p^*}\underbrace{\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{h}p.x}\right)}_{\psi_p}dx=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{p^2}{\hbar^2}\right)\int_{-\infty}^{\infty}\psi_p^*\psi_p dx=$$

$$=\ \ldots\ \textit{съгласно (3)}\ \ldots\ =\frac{p^2}{2m}=\frac{\hbar^2}{2m}p_0^2.$$

Задача ❸: Състоянието на частица, намираща се в потенциална яма със ширина a, се описва с вълнова функция

$$\psi_n(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi}{a}x, & 0<x<a\\ 0, & x<0,\,x>a\end{cases},\quad n=1,2,\ldots$$

Да се определят средните стойности на координатата $\langle x\rangle$, на импулса $\langle p_x\rangle$ и на квадрата на импулса $\langle p^2\rangle$ на частицата.

Решение:

а) нека определим най-напред средната стойност на координатата $\langle x\rangle$. Очевидно $\psi_n^*\equiv\psi_n$ (*реална вълнова функция*), следователно

$$(1)\qquad \langle x\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*\hat{x}\psi_n dx\equiv\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n\hat{x}\psi_n dx=\int_0^a\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}x\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}dx=$$

$$=\frac{2}{a}\int_0^a x\sin^2\frac{n\pi x}{a}dx=\frac{2}{a}\int_0^a x\frac{1}{2}\left(1-\cos\frac{2n\pi}{a}x\right)dx=\frac{1}{a}\int_0^a xdx-\frac{1}{a}\underbrace{\int_0^a x\cos\frac{2n\pi}{a}xdx}_{I}=$$

$$=\frac{1}{a}\frac{a^2}{2}-\frac{1}{a}I=\frac{a}{2}-\frac{1}{a}I.$$

Нека решим отделно интеграла I:

$$(2)\qquad I=\frac{a}{2n\pi}\int_0^a x\cos\frac{2n\pi}{a}x\,d\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)=\frac{a}{2n\pi}\int_0^a x\,d\left(\sin\frac{2n\pi}{a}x\right)=\ \ldots\ \text{по части}\ \ldots$$

$$=\underbrace{\frac{2n\pi}{a}x\sin\frac{2n\pi}{a}x\Bigg|_0^a}_{0}-\frac{a}{2n\pi}\int_0^a\sin\frac{2n\pi}{a}x\,dx=-\frac{a}{2n\pi}\frac{a}{2n\pi}\int_0^a\sin\frac{2n\pi}{a}x\,d\left(\frac{a}{2n\pi}\right)=$$

$$=-\left(\frac{a}{2n\pi}\right)^2\left(-\cos\frac{2n\pi}{a}x\right)\Bigg|_0^a=\left(\frac{a}{2n\pi}\right)^2\left\{\cos\frac{2n\pi}{a}a-\cos\frac{2n\pi}{a}0\right\}=\left(\frac{a}{2n\pi}\right)^2(\cos2\pi-\cos0)=$$

$$=\left(\frac{a}{2n\pi}\right)^2(1-1)=0.$$ И така интегралът $I=0$.

С това доказахме всъщност, че

(3) $\quad \langle x\rangle=\dfrac{a}{2}.$

б) Определяне средната стойност на импулса $\langle p_x\rangle$:

$$\langle p_x\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*\hat{p}_x\psi_n dx\equiv\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n\hat{p}_x\psi_n dx=\int_0^a\psi_n\left[\frac{h}{i}\frac{d\psi_n}{dx}\right]dx=\frac{h}{i}\int_0^a\psi_n d\psi_n=$$

$$=\frac{h}{i}\int_0^a\frac{d\psi_n{}^2}{2}=\frac{h}{2i}\int_0^a d\psi_n{}^2=\frac{h}{2i}\psi_n{}^2\Bigg|_0^a=\frac{h}{2i}\left[\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\right]^2\Bigg|_0^a=$$

$$=\frac{h}{2i}\frac{2}{a}\sin^2\frac{n\pi x}{a}\Bigg|_0^a=\frac{h}{ia}\left(\sin^2\frac{n\pi a}{a}-\sin^2\frac{n\pi 0}{a}\right)\equiv0.$$

И така доказахме, че $\langle p_x\rangle=0$, което е напълно естествено и обяснимо, понеже в направление на оста Ох са равновероятни както проекциите $\vec{p}_x$, така и проекциите $(-\vec{p}_x)$ на импулса.

в) Определяне средната стойност на квадрата на импулса $\langle p^2\rangle$:

$\hat{p}=-i\hbar\nabla$, но в едномерния случай, който разглеждаме в задачата, очевидно $\hat{p}\equiv\hat{p}_x=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$. Следователно

(4) $\quad \hat{p}^2=-\hbar^2\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}.$

Тогава

$$\langle p^2\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*\hat{p}^2\psi_n dx\equiv\int_0^a\psi_n(-\hbar^2)\frac{\partial^2\psi_n}{\partial x^2}dx=\int_0^a\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}(-\hbar^2)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\right]dx=$$

$$=-\frac{2\hbar^2}{a}0\int_{-\infty}^{a}\sin\frac{n\pi x}{a}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[\sin\frac{n\pi x}{a}\right]dx.$$

Нека определим отделно втората производна:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left[\sin\frac{n\pi x}{a}\right]=\frac{n\pi}{a}\cos\frac{n\pi x}{a};$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[\sin\frac{n\pi}{a}x\right]=\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{n\pi}{a}\cos\frac{n\pi}{a}x\right)=\frac{n\pi}{a}.\frac{n\pi}{a}(-\sin\frac{n\pi}{a}x)=-\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2\sin\frac{n\pi}{a}x.$$

Заместваме така намерената втора производна в интеграла, и получаваме

$$\langle p^2\rangle=-\frac{2\hbar^2}{a}\left(-\frac{n^2\pi^2}{a^2}\right)\int_0^a\sin\frac{n\pi x}{a}\sin\frac{n\pi x}{a}dx=\frac{2\hbar^2n^2\pi^2}{a^3}\int_0^a\frac{1}{2}\left(1-\cos\frac{2n\pi}{a}x\right)dx=$$

$$=\frac{\hbar^2 n^2\pi^2}{a^3}\int_0^a dx-\frac{\hbar^2 n^2\pi^2}{a^3}\int_0^a \cos\frac{2n\pi}{a}x\,dx=\frac{\hbar^2 n^2\pi^2}{a^3}a-\frac{\hbar^2 n^2\pi^2}{a^3}\frac{a}{2n\pi}\int_0^a \cos\frac{2n\pi}{a}x\,d\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)=$$

$$=\frac{\hbar^2 n^2\pi^2}{a^2}-\frac{\hbar^2 n\pi}{2a^2}\underbrace{\left.\left(\sin\frac{2n\pi}{a}x\right)\right|_0^a}_{0}=\frac{\hbar^2 n^2\pi^2}{a^2}.$$

И така

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

**Допълнение*: средната стойност $\left\langle p^2\right\rangle$ може да бъде определена и директно, като се използва, че за $0<x<a$ вълновата функция $\psi(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x$ е собствена функция на оператора $\hat{p}$, а следователно и на оператора $\hat{p}^2$, който комутира с $\hat{p}$. Следователно $\left\langle p^2\right\rangle$ може да бъде представена като собствена стойност на оператора $\hat{p}^2$, т.е.

(6) $$\hat{p}^2\psi_n(x)=\left\langle p^2\right\rangle\psi_n(x).$$

Действително за $0<x<a$

$$\hat{p}^2\psi_n(x)=-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\right]=-\hbar^2\sqrt{\frac{2}{a}}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\sin\frac{n\pi x}{a}\right)=\text{ … вече я изчислихме … }=$$

$$=-\hbar^2\sqrt{\frac{2}{a}}\left[-\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2\sin\frac{n\pi}{a}x\right]=\underbrace{\frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{a^2}}_{\left\langle p^2\right\rangle}\underbrace{\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}}_{\psi_n(x)}=\left\langle p^2\right\rangle\psi_n(x),$$

с което отново доказахме, че $\left\langle p^2\right\rangle=\frac{\hbar^2\pi^2}{a^2}n^2$.

Тема: Потенциални ями. Бариерни задачи на КМ

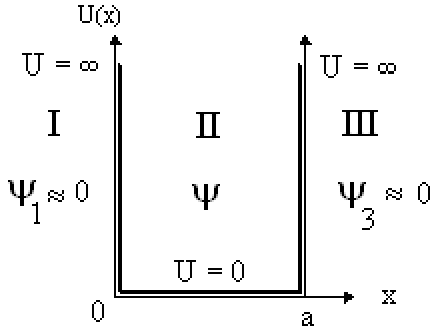
Задача ❶: Частица с маса m се намира в едномерна потенциална яма с безкрайно високи стени

$$U(x)=\begin{cases}\infty, & x<0;\, x>a\\ 0, & 0\le x\le a\end{cases}$$

Да се определят възможните енергетични състояния (*енергетичния спектър*) и вълновата функция на частицата в потенциалната яма.

Решение: ще намерим **енергетичния спектър** (*спектърът от „позволените" енергии*) и **стационарните вълнови функции** (*вълновите функции на „позволените" състояния*) на частица, движеща се в поле с потенциал от вида

$$U(x)=\begin{cases}\infty, & x<0\\ 0, & 0<x<a\\ \infty, & x>a\end{cases}$$, където a е **ширината** на ямата.



Очевидно имаме случай на **едномерно движение**, при което потенциалът $U(x)$ очевидно не зависи от времето, следователно за описание движението (*състоянието*) на частицата във всяка от трите области (*виж чертежа*) можем да използваме едномерното стационарно уравнение на Шрьодингер, решаването на което ще ни позволи да определим стационарните състояния (*състоянията с точно определена енергия*) на частицата.:

(*) $$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-U(x)\right]\psi(x)=0.$$

Записваме (*написваме*) го **за всяка от трите области**:

I област: $x<0$, в която $U(x)=\infty$

(1) $$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-\infty\right]\psi_1(x)=0.$$

II област: $0<x<a$, в която $U(x)=0$

(2) $$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi(x)=0.$$

III област: $x>a$, в която $U(x)=\infty$

(3) $$\frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-\infty\right]\psi_3(x)=0.$$

Уравнения (1) и (3) са идентични. Ще покажем, че вероятността частицата да се намира в област I или в област III е **равна на нула**.

(4) $$\frac{d^2\psi_{1(3)}(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi_{1(3)}(x)-\frac{2m}{\hbar^2}.\infty.\psi_{1(3)}(x)=0.$$

В горното равенство (4) трябва енергията E да е положително-определена константа (т.е. $E>0$). Вторият член $\frac{2m}{\hbar^2}E\psi_{1(3)}(x)$ в лявата страна на (4) е много по-малък от третия член $\frac{2m}{\hbar^2}.\infty.\psi_{1(3)}(x)$, поради което може да бъде пренебрегнат. Така уравнение (4) добива вида

$$\frac{d^2\psi_{1(3)}(x)}{dx^2}\approx\frac{2m}{\hbar^2}.\infty.\psi_{1(3)}(x), \text{ или още } \frac{d^2\psi_{1(3)}(x)}{dx^2}\approx\infty.\psi_{1(3)}(x).$$

Ако двете страни на последното равенство разделим (*формално*) с $\psi_{1(3)}(x)$, ще получим представянето

$$\frac{1}{\psi_{1(3)}(x)}\frac{d^2\psi_{1(3)}(x)}{dx^2}\approx\infty,$$

от което можем да заключим, че $\psi_{1(3)}(x)\approx 0$, което недвусмислено доказва, че действително вероятността частицата да се намира в област I или в област III е (*почти*) равна на нула.

Следва още тук да отбележим, обаче, че **съществува минимална вероятност** частицата да се намира (*да бъде намерена*) в I$^{-ва}$ или в III$^{-та}$ област. Явлението, при което това се случва, се нарича **<u>тунелен ефект</u>**. На този ефект се основава действието на т.нар. „тунелни” диоди.

Следователно остава да решим само уравнението (2) в областта II, а именно при $0 < x < a, \quad U(x) = 0$:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\,E\psi(x) = 0.$$

Полагаме $\frac{2m}{\hbar^2}\,E = k^2 > 0$, като очевидно $k \in \Re$. Тогава

(*) $$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\,\psi(x) = 0.$$

Вижда се, че това е ЛХОДУ (*линейно хомогенно обикновено диференциално уравнение*) от II ред с постоянни коефициенти, решението на което може да бъде търсено във вида $\psi(x) = C.e^{\alpha x}$. След заместване на $\psi(x)$ в (*) се получава следното **характеристично уравнение**

(5) $\alpha^2 + k^2 = 0,$

чиито корени са $\alpha_{1,2} = \pm i\,k$ (*комплексно-спрегнати числа*).

Следователно общото решение на (2) ще има вида

(6) $\psi(x) = c_1\cos(kx) + c_2\sin(kx)$.

Коефициентите c_1 и c_2, фигуриращи в (6), могат да бъдат определени от условието (*изискването*) вълновата функция $\psi(x)$ да е **непрекъсната** в точките $x = 0$ и $x = a$. (*Забележка*: освен че трябва да е непрекъсната във **всяка** точка, вълновата функция ψ трябва в ∞ да е равна на **нула**). Прилагайки изискванията за непрекъснатост, получаваме:

$$\begin{matrix}(7^A)\\(7^Б)\end{matrix}\quad \left|\begin{matrix}\psi(0) = 0\\ \psi(a) = 0\end{matrix}\right. \Leftrightarrow \left|\begin{matrix}c_1 = 0\\ c_2\sin k.a = 0\end{matrix}\right.$$

С отчитането на ($7^А$) вълновата функция $\psi(x)$ на частицата в безкрайната едномерна потенциална яма се представя във вида

($6^А$) $\boxed{\psi(x) = c_2\sin(kx)}$

Нека видим до какви следствия води изпълнението на ($7^Б$). Могат да се разгледат два случая: $c_2 = 0$ и $\sin k.a = 0$, които следва да бъдат разгледани поотделно.

1) $c_2 = 0$, но тогава съгласно ($6^А$) трябва и $\psi(x) = 0$, което би означавало, че вероятността частицата да бъде намерена в потенциалната яма е равна на нула, т.е. <u>няма частица</u> (*тривиален случай, който игнорираме*). Остава случаят

2) $\sin k.a = 0 \quad \Rightarrow$ (8) $k.a = n.\pi$, при $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$.

От (8) следва, че

(9) $$k^2 = \frac{\pi^2 n^2}{a^2},$$

и понеже положихме $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\,E$, то $\frac{2m}{\hbar^2}\,E_n = \frac{\pi^2 n^2}{a^2}$, с което стигаме до следното представяне за енергията на частицата

(10) $$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\,n^2 \quad \text{при } n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots .$$

Оказва се, че енергията на частицата в безкрайната потенциална яма зависи от „n”, т.е. **енергетичният спектър на частицата е дискретен** и се квантува.

Както вече отбелязахме енергията E е положително-определена константа ($E > 0$), следователно трябва $n \neq 0$, т.е. възможните стойности на „n” са $n = \pm 1, \pm 2, \ldots$..

И така доказахме, че дискретните стойности на енергията, които частицата може да притежава, намирайки се в безкрайна едномерна потенциална яма, са

(10^{А}) $E_n = \dfrac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2$ при $n = \pm 1, \pm 2, \ldots$.

Тъй като енергията се изразява чрез „n”, то „n” има смисъл на **главно квантово число**.

Енергетичният спектър е дискретен, т.е. частицата приема (*притежава*) точно определени **стойности на енергията**:

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}\ ;\ E_2 = 4\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}\ ; \qquad E_3 = 9\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}\ ; \qquad E_4 = 16\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}\ ;\ \ldots\ldots\ldots\ldots$$

Разликите в енергиите $\Delta E_i = E_{i+1} - E_i$ между две съседни енергетични нива са:

$$\Delta E_1 = E_2 - E_1 = 3\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2};\ \Delta E_2 = E_3 - E_2 = 5\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2};\ \Delta E_3 = E_4 - E_3 = 7\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad \text{и т.н.,}$$

следователно $\Delta E_1 : \Delta E_2 : \Delta E_3 : \ldots = 3 : 5 : 7 : \ldots$, откъдето следва важният извод, че **енергетичните нива на частицата не са еквидистантни** (*т.е. не отстоят едно от друго на едни и същи енергетични „разстояния”*).

След определянето на енергетичния спектър на частицата остана въпроса за намиране на нейните **стационарните вълнови функции**. От (6^{А}) имаме следното представяне за тях

(11) $\psi(x) = c_2 \sin(kx)$,

като очевидно константата c_2 остана <u>*неопределена*</u>. Ще я определим от условието за нормировка на вълновата функция, което за случая на едномерна потенциална яма с ширина a, т.е. $0 \le x \le a$, се записва във вида

(12) $\displaystyle\int_0^a \left|\psi(x)\right|^2 dx = 1$,

или още $\displaystyle |c_2| \int_0^a \sin^2(k.x)\, dx = 1$. Очевидно $|c_2| = \dfrac{1}{\sqrt{I}}$, където с I е обозначен интегралът

$$I = \int_0^a \sin^2(k.x)\, dx = \int_0^a \frac{1-\cos(2k.x)}{2} dx = \int_0^a \frac{1}{2} dx - \frac{1}{2}\int_0^a \cos(2k.x)\, dx = \frac{a}{2} - \frac{1}{2}.\frac{1}{2k}\int_0^a \cos(2k.x)\, d(2k.x) =$$

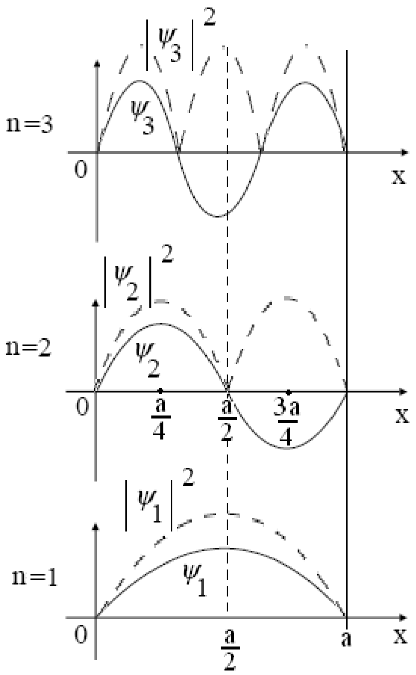
$$= \frac{a}{2} - \frac{1}{4k}(-\sin(2kx))\Bigg|_{x=0}^{x=a} = \frac{a}{2} + \frac{1}{4k}[\sin(2k.a) - \sin(2k.0)] = \frac{a}{2} + \frac{\sin(2k.a)}{4k} = \frac{a}{2},$$

като в последното равенство е отчетено, че $\sin(2k.a) = 0$, понеже разглежданията дотук се отнасят за случая $\sin k.a = 0$, при който е в сила равенство (7^{Б}). (<u>*Пояснение*</u>: щом $\sin k.a = 0$, то $\Rightarrow$ и $\sin(2k.a) = 2.\underbrace{\sin(k.a)}_{0}.\cos(k.a) = 0$).

И така, интегралът $I=\dfrac{a}{2}$, следователно $\left|c_2\right|=\dfrac{1}{\sqrt{I}}=\sqrt{\dfrac{2}{a}}$. С намирането на константата c_2, и с отчитане на намереното вече представяне $k=\dfrac{\pi.n}{a}$, изразът (11) за **стационарните вълнови функции** на частицата добива вида

$$(13)\qquad \psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi.n}{a}x\right)\quad \text{при } n=\pm1,\pm2,\ldots .$$

<u>**Извод**</u>: Съотношенията (13) задават стационарни(те) **вълнови функции**, описващи движението на частицата в едномерната безкрайна потенциална яма. Тези вълнови функции зависят единствено от главното квантово число „n”. За всяко „n” имаме **точно определена енергия** E_n и **точно една стационарна вълнова функция** $\psi_n(x)$, която описва поведението (състоянието) на частицата:



$$n=1,\qquad \psi_1(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right);$$

$$n=2,\qquad \psi_2(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right);$$

$$n=3,\qquad \psi_3(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{3\pi}{a}x\right);$$

$$\vdots$$

$$n>3,\qquad \psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right).$$

Понеже всички функции $\psi_n(x)$ имат възли (*минимуми*) в краищата на потенциалната яма, то може да се изкаже твърдението, че най-вероятно е частицата да се намира (*в даден момент*) в средата (*или около средата*) на потенциалната яма.

Точките, в които вероятността да намерим частицата е равна на нула, се наричат **възли на вълновата функция**. При главно квантово число „n” броят на възлите е $(n-1)$. При големи стойности на „n” се проявяват някои много съществени квантовомеханични ефекти, докато при $n=1$ имаме почти класически случай.

Задача ❷: Частица с маса m и енергия E извършва едномерно движение. На пътя на частицата се намира едномерна потенциална бариера с височина U и безкрайна ширина

$$(1)\qquad U(x)=\begin{cases}0, & x<0\\ U, & x\geq 0\end{cases}.$$

Да се определят възможните енергетични състояния (*енергетичния спектър*) и вълновата функция на частицата в присъствието на потенциалната бариера. Да се анализират случаите: а) $0<E<U$, б) $0<U<E$, и в) $U<0$.

Решение:

I. Нека започнем с първия случай $0 < E < U$. За удобство условно ще наричаме „**първа**” областта ($x < 0$) в която липсва потенциална бариера ($U = 0$), а „**втора**” - областта ($x \geq 0$) в която има потенциална бариера ($U(x) = U \neq 0$). Задачата е стационарна, затова прилагаме СУШ:

(2) $\hat{H}\psi = E\psi$, т.е. $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U\right)\psi = E\psi$,

където в едномерния случай $\Delta \to \frac{d^2}{dx^2}$, следователно при $\psi = \psi(x)$

(3) $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U\right)\psi = E\psi$.

Прилагаме едномерното СУШ (3) за двете области поотделно:

☞ в първата област

(4) $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_1}{dx^2} = E\psi$, $x < 0$

т.е. $\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_1 = 0$, или още

(5) $\boxed{\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k_1^2\psi_1 = 0}$,

където

(6) $k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$.

☞ във втората област

(7) $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + U\psi_2 = E\psi_2$, $x \geq 0$,

т.е. $\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi_2 = 0$, или още

(8) $\boxed{\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + k_2^2\psi_2 = 0}$,

където

(9) $k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - U)}$.

Очевидно за случая $0 < E < U$, който разглеждаме, е изпълнено $E - U < 0$, поради което $k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - U)} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(-1)(U - E)} = i\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U - E)}$ е чисто имагинерна величина.

Нека решим диференциалните уравнения (5) и (8) за двете области. Понеже и двете уравнения са от типа „уравнение на хармоничен осцилатор”, то техните решения са съответно

(10) $\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$,

като вълната $\psi_1^I(x) = Ae^{ik_1x}$ е очевидно **падаща вълна**, а вълната $\psi_1^R(x) = Be^{-ik_1x}$ е **отразена вълна**. Аналогично

(11) $\psi_2(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}$,

обаче тъй като бариерата е безкрайна, то в нея няма как да се формира отразена вълна (*няма как такава вълна да дойде от* $+\infty$), следователно трябва да приемем $D \equiv 0$, с което решението на (8) добива вида

(12) $\psi_2(x) = Ce^{ik_2 x}$.

За намирането на трите константи A, B, C прилагаме граничните условия:

(13) $\psi_1(x)_{|x=0} = \psi_2(x)_{|x=0}$, $\Rightarrow$ (14) $A + B = C$, и

(15) $\dfrac{d\psi_1}{dx}_{|x=0} = \dfrac{d\psi_2}{dx}_{|x=0}$, $\Rightarrow$ $ik_1 A - ik_1 B = ik_2 C$, откъдето следва

(16) $k_1(A - B) = k_2 C$.

Така получаваме системата (неопределена)

(17) $\left| \begin{array}{l} A + B = C \\ A - B = \dfrac{k_2}{k_1} C \end{array} \right.$ $\Rightarrow$ $2A = C + \dfrac{k_2}{k_1} C \equiv \dfrac{k_1 + k_2}{k_1} C$, откъдето

(18) $C = \dfrac{2k_1}{k_1 + k_2} A$.

Константата B определяме от (17) и (18)

$$B = C - A = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A - A = \frac{2k_1 - k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A, \text{ т.е.}$$

(19) $B = \dfrac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A$.

Нека за всяка една от трите вълни в двете среди определим плътността на потока на вероятността

(20) $j = \dfrac{i\hbar}{2m}\left(\psi \dfrac{d\psi^*}{dx} - \psi^* \dfrac{d\psi}{dx} \right)$.

а) За падащата вълна $\psi_1^I(x) = Ae^{ik_1 x}$ в първата среда

$$j_I = \frac{i\hbar}{2m}\left(Ae^{ik_1 x} \frac{d(Ae^{ik_1 x})^*}{dx} - (Ae^{ik_1 x})^* \frac{d(Ae^{ik_1 x})}{dx} \right) =$$

$$= \frac{i\hbar}{2m}(A.A^*)\left(e^{ik_1 x} \frac{de^{-ik_1 x}}{dx} - e^{-ik_1 x} \frac{de^{ik_1 x}}{dx} \right) = \frac{i\hbar}{2m}|A|^2(-ik_1 - (ik_1)) = \frac{\hbar k_1}{m}|A|^2,$$

т.е.

(21) $\boxed{j_I = \dfrac{\hbar k_1}{m}|A|^2}$.

б) За отразената вълна $\psi_1^R(x) = Be^{-ik_1 x}$ в първата среда

$$j_R = \frac{i\hbar}{2m}\left(Be^{-ik_1 x} \frac{d(Be^{-ik_1 x})^*}{dx} - (Be^{-ik_1 x})^* \frac{d(Be^{-ik_1 x})}{dx} \right) =$$

$$= \frac{i\hbar}{2m}(B.B^*)\left(e^{-ik_1 x} \frac{de^{ik_1 x}}{dx} - e^{ik_1 x} \frac{de^{-ik_1 x}}{dx} \right) = \frac{i\hbar}{2m}|B|^2(ik_1 - (-ik_1)) = -\frac{\hbar k_1}{m}|B|^2,$$

т.е.

(22) $\boxed{j_R = \frac{\hbar k_1}{m} | B |^2}$.

в) За преминала вълна $\psi_2^T(x) = Ce^{ik_2x}$ във втората среда

$$j_T = \frac{i\hbar}{2m}\left(Ce^{ik_2x}\frac{d(Ce^{ik2x})^*}{dx} - (Ce^{ik_1x})^*\frac{d(Ce^{ik2x})}{dx}\right) =$$

$$= \frac{i\hbar}{2m}(C.C^*)\left(e^{ik_2x}\frac{de^{-ik_2x}}{dx} - e^{-ik_2x}\frac{de^{ik_2x}}{dx}\right) = \frac{i\hbar}{2m}| C |^2(-ik_2 - (ik_2)) = \frac{\hbar k_2}{m}| C |^2,$$

т.е.

(23) $\boxed{j_T = \frac{\hbar k_2}{m} | C |^2}$.

Сега вече сме в състояние да определим съответно:

❖ Коефициент на отражение на вълната от потенциалния бариер

(23) $$R = \left| \frac{j_R}{j_I} \right| = \frac{\hbar k_1}{m} | B |^2 / \frac{\hbar k_1}{m} | A |^2 = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{\left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 | A^2 |^2}{|A|^2} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2.$$

❖ Коефициент на пропускане на (*през*) потенциалния бариер

(24) $$T = \left| \frac{j_T}{j_I} \right| = \frac{\hbar k_2}{m} | C |^2 / \frac{\hbar k_1}{m} | A |^2 = \frac{k_2}{k_1}\frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{k_2}{k_1}\frac{\left(\frac{2k_1}{k_1 + k_2}\right)^2 | A^2 |^2}{|A|^2} = \frac{k_2}{k_1}\frac{4k_1^2}{(k_1 + k_2)^2}$$

или още

(25) $$T = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}.$$

От (23) и (25) непосредствено се вижда, че $R + T = 1$.

Нека изразим коефициента на пропускане T, отчитайки представянията (6) и (9)

(26) $$T = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{4\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)}}{\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} + \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)}\right)^2} = \frac{4\frac{2m}{\hbar^2}\sqrt{E}\sqrt{(E-U)}}{\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\right)^2\left(\sqrt{E} + \sqrt{(E-U)}\right)^2} =$$

$$= \frac{4\sqrt{E(E-U)}}{E + 2\sqrt{E(E-U)} + E - U} = \frac{4\sqrt{E(E-U)}}{2E + 2\sqrt{E(E-U)} - U}.$$

Както вече видяхме при $0 < E < U$ коефициентът

(27) $$k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)} = i\underbrace{\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U-E)}}_{\text{Реално число}} \equiv i\chi$$

е чисто имагинерна величина. Следователно вълната във втората среда (*преминала вълна*) ще има вида

(28) $$\psi_2(x) = Ce^{ik_2x} = Ce^{i(i\chi)x} = Ce^{-\chi x},$$

и това (*очевидно*) е експоненциално затихваща вълна.

Анализ на други случаи:

① Когато $E = U$, се оказва, че съгласно (27) $k_2 = 0$, при което

(29^{А}) $R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 \equiv \left(\frac{k_1}{k_{12}}\right)^2 = 1;$

(29^{Б}) $T = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2} \equiv 0.$

② Когато $0 < U < E$, то $k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)}$ е реално, а не имагинерно число, поради което полето на преминалата вълна $\psi_2(x) = Ce^{ik_2 x}$ има „осцилиращ" характер.

③ Случаят $U < 0$ по нищо (принципно) не се различава от случая ②. На преден план изпъква, обаче, едно важно обстоятелство: оказва се че в този случай $k_2 > k_1$. Действително, при $U < 0$ можем да представим потенциалната енергия във вида $U = -|U|$, откъдето съгласно (9) и (6) получаваме

(30) $k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}[E-(-|U|)]} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}[E+|U|]} > \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E} = k_1.$

Но щом $k_2 > k_1$, то от (19) ще следва, че $B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}A < 0$ (приемаме, че $A > 0$). И понеже в такъв случай $B = (-1).|B| = e^{i\pi}|B|$, то очевидно можем да заключим, че фазата на отразената вълна се променя с π, понеже съгласно (10)

$\psi_1^R(x) = Be^{-ik_1 x} = e^{i\pi}|B|e^{-ik_1 x} = |B|e^{-ik_1 x + i\pi} = |B|e^{-i(k_1 x + \pi)}$.

А в частност ако $|U| >> 1$ (*безкрайно дълбока потенциална яма*), то

(31) $k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}[E+|U|]} >> \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E} = k_1$, т.е. $k_2 >> k_1$,

при което

(32) $B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}A \approx \frac{-k_2}{k_2}A = -A$, и

(33) $C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}A \approx \frac{2k_1}{k_2}A \approx 0.$

Тогава коефициентът на отражение на потенциалния бариер ще бъде

(34) $R = \frac{|B|^2}{|A|^2} \equiv \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 = 1,$

а коефициента на пропускане ще е

(35) $T = \frac{k_2}{k_1}\frac{|C|^2}{|A|^2} \equiv \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2} \approx 0,$

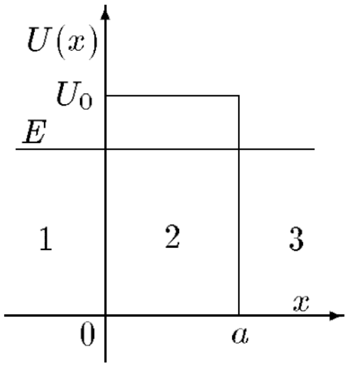
което означава, че в този случай, колкото и неочевидно и изненадващо да е това, потенциалният бариер действа като своеобразно идеално „огледало" (*в квантовомеханичен смисъл, разбира се*).

Задача ❸: Едномерно движение на частица с маса m и енергия E. На пътя на частицата се намира едномерна потенциална бариера с височина U и крайна ширина

(1) $$U(x)=\begin{cases}0, & x<0\\ U, & 0\le x\le a\\ 0, & x>a\end{cases}$$

Да се определят възможните енергетични състояния (*енергетичния спектър*) и вълновата функция на частицата в присъствието на потенциалната бариера. Да се анализира случаят $E<U$. Да се определи коефициента на пропускане.

Решение:



Нека най-напред разгледаме случая $E<U$. Използваме СУШ

(2) $$\hat{H}\psi(x)=E\psi(x),$$

което за едномерния случай, който разглеждаме, има вида

(3) $$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+U(x)\right)\psi(x)=E\psi(x).$$

Нека „разпишем" уравнението (3) за всяка една от трите области:

А) За областта 1:

($4^а$) $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_1}{dx^2}=E\psi_1,\qquad \text{т.е.}\qquad \frac{d^2\psi_1}{dx^2}+k^2\psi_1=0,\quad \text{където}\qquad \boxed{k=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}}.$$

Б) За областта 2:

($4^б$) $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_2}{dx^2}+U\psi_2=E\psi_2,\ \text{т.е.}\ \frac{d^2\psi_2}{dx^2}+k_2^{\,2}\psi_2=0,\ \text{където}\quad \boxed{k_2=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}[E-U]}}.$$

И понеже (*по условие*) $E<U$, то очевидно $k_2=i\chi_2$, където $\chi_2=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}[U-E]}$ е реална величина.

В) За областта 3, аналогично за областта 1, имаме

($4^в$) $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_3}{dx^2}=E\psi_3,\qquad \text{т.е.}\qquad \frac{d^2\psi_3}{dx^2}+k^2\psi_3=0,\quad \text{където отново } k=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}.$$

Нека решим уравненията ($4^{а,\,б,\,в}$):

(а) решението на ($4^а$), което е всъщност уравнение на хармоничен осцилатор, може да бъде представено във вида

($5^а$) $\psi_1(x)=A_1e^{ikx}+A_2e^{-ikx}$, за $x<0$, като

$\psi_1^{\,I}=A_1e^{ikx}$ - **падаща вълна**;

$\psi_1^{\,R}=A_2e^{-ikx}$ - **отразена вълна**.

(б) решението на ($4^б$) е

($5^б$) $\psi_2(x)=B_1e^{ik_2x}+B_2e^{-ik_2x}$, за $0\le x\le a$.

(в) решението на ($4^в$) е

($5^в$) $\psi_3(x)=C_1e^{ik(x-a|}+C_2e^{-ik(x-a)}$, за $x>a$,

но понеже от т. $x=a$ до $+\infty$ няма друга потенциалоформираща структура, то няма как да възникне отразена вълна $C_2e^{-ik(x-a)}$, разпространяваща се „отдясно наляво", затова трябва да приемем $C_2\equiv 0$, при което решението ($5^в$) ще добие вида

(6) $\quad \psi_3(x) = C_1 e^{ik(x-a|}, \qquad$ за $\qquad x > a$.

Неизвестните коефициенти A_1, B_1, C_1, A_2, B_2 определяме от условието за непрекъснатост на вълновата функция и на първата й производна в двете гранични точки $x = 0$ и $x = a$.

I. Прилагане на граничните условия в т. $x = 0$:

(7) $\quad \psi_{1\,|x=0} = \psi_{2\,|x=0}, \qquad \Rightarrow \qquad A_1 + A_2 = B_1 + B_2$.

$$\frac{d\psi_1}{dx}_{|x=0} = \frac{d\psi_2}{dx}_{|x=0}, \qquad \text{т.е.} \qquad ikA_1 - ikA_2 = ik_2B_1 - ik_2B_2 \qquad \Big| : i$$

(8) $\quad \boxed{k(A_1 - A_2) = k_2(B_1 - B_2)}$.

II. Прилагане на граничните условия в т. $x = a$:

(9) $\quad \psi_{2\,|x=a} = \psi_{3\,|x=a}, \qquad$ т.е.

(10) $\quad \boxed{B_1 e^{ik_2 a} + B_2 e^{-ik_2 a} = C_1}$.

$$\frac{d\psi_2}{dx}_{|x=a} = \frac{d\psi_3}{dx}_{|x=a}, \ \text{т.е.} \ ik_2B_1e^{ik_2 a} - ik_2B_2e^{-ik_2 a} = ikC_1e^{ik(a-a)} \equiv ikC_1 \qquad \Big| : i$$

(11) $\quad \boxed{k_2\{B_1e^{ik_2 a} - B_2e^{-ik_2 a}\} = kC_1}$.

И така получихме система от 4 уравнения – (7), (8), (10) и (11) – за 5 неизвестни. За да бъде „решима” тази система, нека приемем, че падащата вълна $\psi_1^I = A_1e^{ikx}$ е нормирана, т.е. $A_1 = 1$ (или $|A| = 1$). Така системата „става” определена, и може да бъде коректно решена.

Общ метод за решаването на подобни системи от алгебрични уравнения са формулите на Крамер (*с детерминанти*), но той би се оказал доста тежък и тромав, затова нека подходим напр. така – да изразим най-напред B_1 и B_2 посредством C_1 от (10) и (11); след това да изразим B_1 и B_2 посредством A_1 от (7) и (8), и накрая да изразим C_1 посредством A_1, което би ни позволило да определим коефициента на пропускане на потенциалната бариера. Нека реализираме този план на работа:

Ако съберем почленно (10) и (11), ще имаме

$$\oplus\left|\begin{aligned} B_1e^{ik_2 a} + B_2e^{-ik_2 a} &= C_1 \\ B_1e^{ik_2 a} - B_2e^{-ik_2 a} &= \frac{k}{k_2}C_1 \end{aligned}\right. \quad \Rightarrow \quad 2B_1e^{ik_2 a} = \frac{k+k_2}{k_2}C_1, \text{ т.е.}$$

(12) $\quad \boxed{B_1 = \dfrac{k+k_2}{2k_2}C_1e^{-ik_2 a}}$.

А ако извадим почленно горните две уравнения, получаваме

$$(-)\left|\begin{aligned} B_1e^{ik_2 a} + B_2e^{-ik_2 a} &= C_1 \\ B_1e^{ik_2 a} - B_2e^{-ik_2 a} &= \frac{k}{k_2}C_1 \end{aligned}\right. \quad \Rightarrow \quad 2B_2e^{-ik_2 a} = \frac{k_2-k}{k_2}C_1, \text{ т.е.}$$

(13) $\quad \boxed{B_2 = \dfrac{k_2-k}{2k_2}C_1e^{ik_2 a}}$.

По принцип бихме могли да продължим по-нататък по набелязания план, но нека преди това отчетем една любопитна подробност, която съществено ще облекчи понататъшния анализ: ще покажем, че $B_2 << B_1$, което ни дава формални основания да приемем, че $B_2 \approx 0$. Действително, ако отчетем, че за разглеждания случай $E < U$ имаме $k_2 = i\chi_2$, където $\chi_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}[U-E]}$ е реална величина, то бихме могли да представим B_1 и B_2 в следния вид:

$$B_1 = \frac{i}{i}\frac{k+i\chi_2}{2i\chi_2}C_1 e^{-i(i\chi_2)a} = \frac{ik-\chi_2}{-2\chi_2}C_1 e^{\chi_2 a}, \text{ т.е.}$$

(14) $$B_1 = \frac{\chi_2 - ik}{2\chi_2}C_1 e^{\chi_2 a}, \text{ и}$$

$$B_2 = \frac{i}{i}\frac{i\chi_2 - k}{2i\chi_2}C_1 e^{i(i\chi_2)a} = \frac{-\chi_2 - ik}{-2\chi_2}C_1 e^{-\chi_2 a}, \text{ т.е.}$$

(15) $$B_2 = \frac{\chi_2 + ik}{2\chi_2}C_1 e^{-\chi_2 a}.$$

Очевидно

$$\frac{B_2}{B_1} = \frac{\chi_2 + ik}{2\chi_2}C_1 e^{-\chi_2 a} / \frac{\chi_2 - ik}{2\chi_2}C_1 e^{\chi_2 a} = \frac{\chi_2 + ik}{\chi_2 - ik}e^{-2\chi_2 a},$$

и понеже $|\chi_2 + ik| = |\chi_2 - ik| = \sqrt{\chi_2{}^2 + k^2}$, то очевидно

(16) $$\left|\frac{B_2}{B_1}\right| = e^{-2\chi_2 a} \approx 0,$$

понеже по полагане реалната величина $\chi_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}[U-E]}$ в степенния показател на (16) е достатъчно голяма (в общия случай). С това изводът $B_2 << B_1$, или още $B_2 \approx 0$ може да се счита за аргументиран.

Нека след всичко това продължим с намирането на интеграционните константи. Първите две уравнения от системата – уравнения (7) и (8) – при $B_2 = 0$ и $A_1 = 1$ имат вида:

(17) $$\left|\begin{array}{l} 1 + A_2 = B_1 \\ k(1 - A_2) = k_2 B_1 \end{array}\right. .$$

Понеже A_2 „не ни трябва ☺", нека я елиминираме

$$\oplus\left|\begin{array}{l} 1 + A_2 = B_1 \\ 1 - A_2 = \frac{k_2}{k}B_1 \end{array}\right. \quad \Rightarrow \quad 2 = \frac{k + k_2}{k}B_1, \text{ откъдето определяме}$$

(18) $$B_1 = \frac{2k}{k + k_2} = \frac{2k}{k + i\chi_2}.$$

Остава с така намереното B_1 да заместим в (15), което би позволило да изразим C_1 в явен вид:

$$B_1 = \frac{\chi_2 - ik}{2\chi_2}C_1 e^{\chi_2 a} \quad \Rightarrow \quad \frac{2k}{k + i\chi_2} = \frac{\chi_2 - ik}{2\chi_2}C_1 e^{\chi_2 a},$$

Откъдето

(19) $$C_1 = \frac{4k\chi_2}{(k+i\chi_2)(\chi_2 - ik)} e^{-\chi_2 a}.$$

Сега вече можем да пристъпим към намирането на коефициента на пропускане на потенциалната бариера: той може да се представи като произведение от коефициентите на пропускане (прозрачност) T_1 и T_2 на всеки от двата гранични слоя (ляв $x=0$ и десен $x=a$) на бариерата, т.е.

(20) $$T = T_1.T_2,$$

където съгласно решена вече задача за потенциален бариер с ∞ ширина са в сила представянията

(21[a]) $$T_1 = \frac{k_2}{k}\frac{|B_1|^2}{|A_1|^2},$$ и (21[б]) $$T_2 = \frac{k}{k_2}\frac{|C_1|^2}{|B_1|^2},$$

и където е отчетено, че за първата гранична повърхност $x=0$ вълната с амплитуден коефициент B_1 представлява преминала вълна, но за втората гранична повърхност $x=a$ същата тази вълна представлява падаща върху тази гранична повърхност. Тогава очевидно

(22) $$T = T_1.T_2 = \frac{k_2}{k}\frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} \times \frac{k}{k_2}\frac{|C_1|^2}{|B_1|^2} = |C_1|^2,$$

където е взето под внимание, че по допускане $A_1 = 1$. И така, оказа се, че коефициентът на пропускане се изразява само и единствено чрез $|C_1|^2$. Нека за целта определим най-напред C_1 и $|C_1|$, използвайки (19):

$$C_1 = \frac{4k\chi_2}{(k+i\chi_2)(\chi_2 - ik)} e^{-\chi_2 a} = \frac{4k\chi_2}{(k+i\chi_2)(\chi_2 - ik)} e^{-\chi_2 a} \times \frac{(k-i\chi_2)(\chi_2+ik)}{(k-i\chi_2)(\chi_2+ik)} =$$

$$= \frac{4k\chi_2[k\chi_2 + ik^2 - i\chi_2{}^2 + k\chi_2]}{(k^2+\chi_2{}^2)(\chi_2{}^2+k^2)} e^{-\chi_2 a} = \frac{4k\chi_2[2k\chi_2 + i(k^2 - \chi_2{}^2)]}{(k^2+\chi_2{}^2)^2} e^{-\chi_2 a} =$$

$$= \frac{4k\chi_2[2k\chi_2]}{(k^2+\chi_2{}^2)^2} e^{-\chi_2 a} + i\frac{k^2-\chi_2{}^2}{(k^2+\chi_2{}^2)^2} e^{-\chi_2 a} \equiv \operatorname{Re} C_1 + i \operatorname{Im} C_1.$$

Тогава $|C_1|^2$ ще бъде по определение

$$|C_1|^2 = \operatorname{Re}^2 C_1 + \operatorname{Im}^2 C_1 = \frac{16k^2\chi_2{}^2[4k^2\chi_2{}^2 + (k^2-\chi_2{}^2)^2]}{(k^2+\chi_2{}^2)^4} e^{-2\chi_2 a} =$$

$$= \frac{16k^2\chi_2{}^2[4k^2\chi_2{}^2 + k^4 - 2k^2\chi_2{}^2 + \chi_2{}^4]}{(k^2+\chi_2{}^2)^4} e^{-2\chi_2 a} = \frac{16k^2\chi_2{}^2[k^4 + 2k^2\chi_2{}^2 + \chi_2{}^4]}{(k^2+\chi_2{}^2)^4} e^{-2\chi_2 a} =$$

$$= \frac{16k^2\chi_2{}^2(k^2+\chi_2{}^2)^2}{(k^2+\chi_2{}^2)^4} e^{-2\chi_2 a} = \frac{16k^2\chi_2{}^2}{(k^2+\chi_2{}^2)^2} e^{-2\chi_2 a} = \frac{16}{\left(\dfrac{k^2+\chi_2{}^2}{k\chi_2}\right)^2} e^{-2\chi_2 a}.$$

И така

(23) $$T = \frac{16}{\left(\frac{k}{\chi_2} + \frac{\chi_2}{k}\right)^2} e^{-2\chi_2 a} \underbrace{=}_{означаваме} D_0 e^{-2\chi_2 a},$$

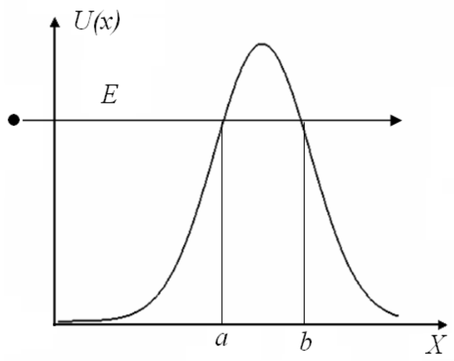
където $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$, а $\chi_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}[U - E]}$, така че

$$D_0 = \frac{16}{\left(\frac{k}{\chi_2} + \frac{\chi_2}{k}\right)^2} = \frac{16}{\left(\sqrt{\frac{E}{U-E}} + \sqrt{\frac{U-E}{E}}\right)^2} = \frac{16}{\left(\frac{E}{U-E} + 2\sqrt{\frac{E}{U-E}}\sqrt{\frac{U-E}{E}} + \frac{U-E}{E}\right)} =$$

$$= \frac{16}{\left(\frac{E}{U-E} + 2 + \frac{U-E}{E}\right)} = \frac{16}{\left(\frac{E^2 + 2E(U-E) + (U-E)^2}{E(U-E)}\right)} = \frac{16E(U-E)}{E^2 + 2EU - 2E^2 + (U-E)^2} =$$

$$= \frac{16E(U-E)}{2EU - E^2 + U^2 - 2EU + E^2} = \frac{16E(U-E)}{U^2}, \text{ т.е.}$$

(24) $$D_0 = \frac{16E(U-E)}{U^2}.$$



С отчитане на представянето за χ_2 формулата (23) за коефициента на пропускане придобива следния окончателен вид

(25) $$T = D_0 e^{-2\chi_2 a} = D_0 e^{-2a\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U-E)}} = D_0 e^{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(U-E)}}.$$

За потенциален бариер с произволна форма горната формула се обобщава така:

(26) $$T = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar}\int_a^b \sqrt{2m[U(x)-E]}\, dx}.$$

Задача ❹: Частица с маса m се намира в едномерна потенциална яма с крайна дълбочина

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

Да се определят възможните енергетични състояния (*енергетичния спектър*) и вълновата функция на частицата в потенциалната яма.

Решение:

А) Нека най-напред разгледаме случая $\boxed{E < 0}$, т.е. $E = -|E|$, но $|E| < |U|$. Състоянието на частицата в потенциалната яма се описва със СУШ

(2) $$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x),$$

което за едномерния случай, който разглеждаме, има вида

(3) $$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x)\right)\psi(x) = E\psi(x).$$

„Разписваме” уравнението (3) за всяка от трите области:

А) За областта 1, където $U = 0$:

(4[а]) $\quad -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\psi_1}{dx^2}=E\psi_1,\qquad$ т.е. $\quad \dfrac{d^2\psi_1}{dx^2}+k^2\psi_1=0,$

където $k=\sqrt{\dfrac{2m}{\hbar^2}E}=\sqrt{\dfrac{2m}{\hbar^2}\{-|E|\}}=i\sqrt{\dfrac{2m}{\hbar^2}|E|}\equiv i\chi$.

Б) За областта 2:

(4[б]) $\quad -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\psi_2}{dx^2}-U_0\psi_2=E\psi_2,$ т.е., $\dfrac{d^2\psi_2}{dx^2}+(E+U_0)\psi_2=0,$

откъдето следва уравнението

$\dfrac{d^2\psi_2}{dx^2}+k_2{}^2\psi_2=0,$ в което $\boxed{k_2=\sqrt{\dfrac{2m}{\hbar^2}[E+U_0]}}$.

В) За областта 3, аналогично за областта 1, имаме при $U=0$

(4[в]) $\quad -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\psi_3}{dx^2}=E\psi_3,\qquad$ т.е. $\quad \dfrac{d^2\psi_3}{dx^2}+k^2\psi_3=0,$ където отново $k=i\sqrt{\dfrac{2m}{\hbar^2}|E|}$.

Нека решим тези ЛОДУ от II ред (4[а, б, в]), които са от типа „уравнение на хармоничен осцилатор”:

(а) решението на (4[а]) може да бъде представено във вида

$$\psi_1(x)=A_1e^{ikx}+A_2e^{-ikx}=A_1e^{i(i\chi)x}+A_2e^{-i(i\chi)x}=A_1e^{-\chi x}+A_2e^{\chi x},\ \text{ за }\ x<0.$$

Лесно се вижда, че при $x\to-\infty$ функцията $\psi_1(x)$ е разходяща, т.е. $\psi_1(x)\to\infty$ поради присъствието на члена $A_1e^{-\chi x}$. Ето защо, за да осигурим ограничеността на вълновата функция в безкрайност, следва да приемем $A_1=0$, с което решението в първата област добива вида

(5[а]) $\quad \psi_1(x)=Ae^{\chi x}=Ae^{\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m|E|}\,x}$.

(б) решението на (4[б]) е

(5[б]) $\quad \psi_2(x)=B_1e^{ik_2x}+B_2e^{-ik_2x},\qquad$ за $\quad 0\le x\le a$.

(в) решението на (4[в]) е

(5[в]) $\quad \psi_3(x)=C_1e^{ikx}+C_2e^{-ikx}=C_1e^{i(i\chi)x}+C_2e^{-i(i\chi)x}=C_1e^{-\chi x}+C_2e^{\chi x}$, за $\ x>a$,

но при $x\to\infty$ се вижда, че $\psi_3(x)\to\infty$ поради присъствието на члена $C_2e^{\chi x}$, затова трябва да приемем $C_2\equiv0$, при което решението (5[в]) ще добие вида

(6) $\quad \psi_3(x)=Ce^{-\chi x}=Ce^{-\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m|E|}\,x},\qquad$ за $\quad x>a$.

Неизвестните коефициенти A, B_1, B_2, C определяме от условието за „съшиване” (условието за непрекъснатост на вълновата функция и на първата й производна в двете гранични точки $x=0$ и $x=a$).

I. Прилагане на граничните условия в т. $x=0$:

(7) $\quad \psi_{1\,|x=0}=\psi_{2\,|x=0},\qquad\Rightarrow\qquad \boxed{A=B_1+B_2}$.

$\quad \dfrac{d\psi_1}{dx}_{|x=0}=\dfrac{d\psi_2}{dx}_{|x=0},\qquad$ т.е. $\quad \chi A=ik_2B_1-ik_2B_2$,

(8) $\boxed{\chi A = i k_2 (B_1 - B_2)}$.

II. Прилагане на граничните условия в т. $x = a$:

(9) $\psi_{2\,|x=a} = \psi_{3\,|x=a}$, т.е.

(10) $\boxed{B_1 e^{i k_2 a} + B_2 e^{-i k_2 a} = C_1 e^{-\chi a}}$.

$\dfrac{d\psi_2}{dx}_{|x=a} = \dfrac{d\psi_3}{dx}_{|x=a}$, т.е. $ik_2 B_1 e^{i k_2 a} - ik_2 B_2 e^{-i k_2 a} = -\chi C e^{-\chi a}$.

(11) $\boxed{i k_2 \{B_1 e^{i k_2 a} - B_2 e^{-i k_2 a}\} = -\chi C e^{-\chi a}}$.

И така получихме хомогенна система от 4 уравнения – (7), (8), (10) и (11) – за 4 неизвестни. Тя може да бъде записана във вида:

$$(12)\quad \left|\begin{array}{lllllll} 1.A & - & 1.B_1 & - & 1.B_2 & + & 0.C = 0 \\ \chi .A & - & ik_2 B_1 & + & ik_2 B_2 & + & 0.C = 0 \\ 0.A & + & e^{ik_2 a} B_1 & + & e^{-ik_2 a} B_2 & - & e^{-\chi a}.C = 0 \\ 0.A & + & ik_2 e^{ik_2 a} B_1 & - & ik_2 e^{-ik_2 a} B_1 & + & \chi e^{-\chi a}.C = 0 \end{array}\right. ,$$

или в матричен запис

$$(13)\quad \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 0 \\ \chi & -ik_2 & ik_2 & 0 \\ 0 & e^{ik_2 a} & e^{-ik_2 a} & -e^{-\chi a} \\ 0 & ik_2 e^{ik_2 a} & -ik_2 e^{-ik_2 a} & \chi e^{-\chi a} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} A \\ B_1 \\ B_2 \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Тази система от уравнения е хомогенна, и следователно има нетривиални решения само ако детерминантата й е равна на нула, т.е. $\Delta = 0$. Нека пресметнем тази детерминанта, като я развием по елементите на първия стълб

$$\Delta = 1.(-1)^{1+1} \begin{vmatrix} -ik_2 & ik_2 & 0 \\ e^{ik_2 a} & e^{-ik_2 a} & -e^{-\chi a} \\ ik_2 e^{ik_2 a} & -ik_2 e^{-ik_2 a} & \chi e^{-\chi a} \end{vmatrix} + \chi (-1)^{2+1)} \begin{vmatrix} -1 & -1 & 0 \\ e^{ik_2 a} & e^{-ik_2 a} & -e^{-\chi a} \\ ik_2 e^{ik_2 a} & -ik_2 e^{-ik_2 a} & \chi e^{-\chi a} \end{vmatrix} =$$

… *вадим* ($e^{-\chi a}$) *от третите стълбове на двете детерминанти, и* (ik_2) *от първата* …

$$= (e^{-\chi a})(ik_2) \begin{vmatrix} -1 & 1 & 0 \\ e^{ik_2 a} & e^{-ik_2 a} & -1 \\ ik_2 e^{ik_2 a} & -ik_2 e^{-ik_2 a} & \chi \end{vmatrix} - \chi (e^{-\chi a})(-1) \begin{vmatrix} 1 & 1 & 0 \\ e^{ik_2 a} & e^{-ik_2 a} & -e^{-\chi a} \\ ik_2 e^{ik_2 a} & -ik_2 e^{-ik_2 a} & \chi e^{-\chi a} \end{vmatrix} =$$

$$= ik_2 e^{-\chi a} \{-\chi e^{-ik_2 a} - ik_2 e^{ik_2 a} - \chi e^{ik_2 a} + ik_2 e^{-ik_2 a}\} + \chi e^{-\chi a} \{\chi e^{-ik_2 a} - ik_2 e^{ik_2 a} - \chi e^{ik_2 a} - ik_2 e^{-ik_2 a}\} =$$

$$= e^{-\chi a} \{-ik_2 \chi e^{-ik_2 a} + k_2^2 e^{ik_2 a} - ik_2 \chi e^{ik_2 a} + k_2^2 e^{-ik_2 a}\} + e^{-\chi a} \{\chi^2 e^{-ik_2 a} - ik_2 \chi e^{ik_2 a} - \chi^2 e^{ik_2 a} - ik_2 \chi e^{-ik_2 a}\} =$$

$$= e^{-\chi a} \{-ik_2 \chi e^{-ik_2 a} + k_2^2 e^{ik_2 a} - ik_2 \chi e^{ik_2 a} + k_2^2 e^{-ik_2 a} + \chi^2 e^{-ik_2 a} - ik_2 \chi e^{ik_2 a} - \chi^2 e^{ik_2 a} - ik_2 \chi e^{-ik_2 a}\} =$$

$$= e^{-\chi a} \{e^{ik_2 a}[k_2^2 - 2ik_2 \chi - \chi^2] - e^{-ik_2 a}[k_2^2 + 2ik_2 \chi - \chi^2]\} = e^{-\chi a} \{[\chi - ik_2]^2 e^{ik_2 a} - [\chi + ik_2]^2 e^{-ik_2 a}\}$$

И така доказахме, че

(14) $\Delta = e^{-\chi a} \{[\chi - ik_2]^2 e^{ik_2 a} - [\chi + ik_2]^2 e^{-ik_2 a}\}$.

Тази детерминанта трябва да е равна на нула, и понеже $e^{-\chi a} \neq 0$, то остава изразът в скобите да е равен на нула, т.е.

(15) $[\chi - ik_2]^2 e^{ik_2 a} - [\chi + ik_2]^2 e^{-ik_2 a} = 0$,

или още

$$\left(\frac{\chi - ik_2}{\chi + ik_2}\right)^2 = e^{i2k_2 a}$$, откъдето след коренуване получаваме

(16) $$\frac{\chi - ik_2}{\chi + ik_2} = \pm e^{ik_2 a} \equiv \pm(\cos k_2 a + i \sin k_2 a).$$

Нека обособим Re и Im част в лявата страна на (16):

$$\frac{\chi - ik_2}{\chi + ik_2} = \frac{\chi - ik_2}{\chi + ik_2} \times \frac{\chi - ik_2}{\chi - ik_2} = \frac{(\chi - ik_2)^2}{\chi^2 - (ik_2)^2} = \frac{(\chi - ik_2)^2}{\chi^2 + k_2{}^2}$$, т.е.

$$\frac{(\chi^2 - k_2{}^2) - 2i\chi k_2}{\chi^2 + k_2{}^2} = \pm(\cos k_2 a + i \sin k_2 a).$$

От приравняването на Re и Im части на двете страни в горното равенство, получаваме

(17) $$\frac{(\chi^2 - k_2{}^2)}{\chi^2 + k_2{}^2} = \pm \cos k_2 a,$$ и (18) $$\frac{2\chi k_2}{\chi^2 + k_2{}^2} = \pm \sin k_2 a,$$

където

(19) $$k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}[E + U_0]} = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m[U_0 - |E|]},$$ понеже $E < 0$,

(20) $$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\{-|E|\}} = \frac{i}{\hbar}\sqrt{2m|E|} \equiv i\chi,$$ където $\chi = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m|E|}$.

Нека сега разгледаме най-напред подслучая на безкрайно-дълбока потенциална яма, т.е. случаят

(21) $U_0 \to \infty$,

откъдето веднага следва, че и $k_2 \to \infty$. Тогава от (18) получаваме

(22) $$\sin k_2 a = \pm \frac{2\chi k_2}{\chi^2 + k_2{}^2} = \pm 2\chi \frac{k_2}{\chi^2 + k_2{}^2} \approx \pm 2\chi \frac{k_2}{k_2{}^2} \equiv \pm 2\chi \frac{1}{k_2} \to 0,$$

следователно щом $\sin k_2 a = 0$, то

(23) $k_2 a = n\pi$, $n = 1,2,3,\ldots.$

***Забележка**: стойността $n = 0$ се пропуска, понеже при $n = 0$ бихме имали $k_2 = 0$, т.е. $U_0 = |E|$, което противоречи на допускането $|E| < U_0$, което сме направили в случая, който разглеждаме.

Ако от (23) изразим k_2 и заместим в (19), получаваме

(24) $$\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m[U_0 - |E|]} = \frac{n\pi}{a},$$

откъдето

$$\frac{2m}{\hbar^2}[U_0 - |E_n|] = \frac{n^2\pi^2}{a^2}, \quad \Rightarrow \quad -|E_n| = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2} - U_0,$$ т.е.

(25) $$E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2} - U_0,$$ $\Rightarrow$ енергията на частицата се квантува.

За същия този подслучай ($U_0 \to \infty$) собствените функции, т.е. вълновите функции вътре в потенциалната яма $0 \le x \le a$, се дават с (5[б]), като се вземе под внимание (23)

(26) $\psi_2(x) = B_1 e^{in\pi\frac{x}{a}} + B_2 e^{-in\pi\frac{x}{a}}$, за $0 \le x \le a$.

Извън потенциалната яма вълновата функция „затихва" експоненциално, защото

☞ $\psi_1(x) = Ae^{\chi x}$, и $\lim\limits_{x\to-\infty} \psi_1(x) = A \lim\limits_{x\to-\infty} e^{\chi x} = A\dfrac{1}{e^{\infty}} \to 0$,

☞ $\psi_3(x) = Ce^{-\chi x}$, и $\lim\limits_{x\to\infty} \psi_3(x) = C \lim\limits_{x\to\infty} e^{-\chi x} = C\dfrac{1}{e^{\infty}} \to 0$.

Тема: Точни решения на уравнението на Шрьодингер в КМ

Задача ❶: Да се определят енергетичните нива на симетричен ротатор (*въртящо се тяло с маса m със свободна ос*).

Решение: изхождаме от СУШ

(1) $\hat{H}\psi = E\psi$.

Понеже $U = const$, можем да приемем (*да считаме*) $U = 0$, следователно

(2) $$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = E\psi.$$

В сферична КС (r,θ,φ) с начало в неподвижния център на въртящата се частица очевидно

(3) $$\frac{\partial\psi(r,\theta,\varphi)}{\partial r} \equiv 0,$$

следователно лапласовият оператор

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

Ще действа върху вълновата функция $\psi(r,\theta,\varphi)$ само посредством ъгловата си компонента $\Delta_{\theta,\varphi}$, т.е.

(5) $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\Delta_{\theta,\varphi}\psi(r,\theta,\varphi) = E\psi(r,\theta,\varphi) \qquad \Bigg| \cdot\left(-\frac{2mr^2}{\hbar^2}\right).$$

Така получаваме уравнението

(6) $$\Delta_{\theta,\varphi}\psi + \lambda\psi = 0,$$

където

(7) $$\lambda = \frac{2mr^2}{\hbar^2}E \equiv \frac{2I}{\hbar^2}E.$$

В горната формула с $I = mr^2$ е означен инерчният момент на въртящия се ротатор. Нека отбележим, че при $r = 1$ вълновата функция $\psi(r,\theta,\varphi)$, удовлетворяваща (6), е нормирана върху единичната сфера

(8) $\quad \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\left|\psi\right|^2 \sin\theta\, d\theta\, d\varphi = 1.$

Очевидно уравнението (6) за собствените стойности и собствените функции има вида

(9) $$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi)}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi)}{\partial\varphi^2}+\lambda\psi=0.$$

Правим разделяне на променливите чрез полагането

(9) $\quad \psi(\theta,\varphi)=\Xi(\theta).\Phi(\varphi)$,

където $\Xi(\theta)$ и $\Phi(\varphi)$ са функции на θ и φ съответно:

(10) $$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Xi(\theta).\Phi(\varphi)\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\Xi(\theta).\Phi(\varphi)+\lambda\,\Xi(\theta).\Phi(\varphi)=0.$$

Умножаваме двете страни на (10) с $\dfrac{\sin^2\theta}{\Xi(\theta).\Phi(\varphi)}$

(11) $$\frac{\sin\theta}{\Xi(\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Xi(\theta)}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\Phi(\varphi)}\frac{\partial^2\Phi(\varphi)}{\partial\varphi^2}+\lambda\sin^2\theta=0,$$

или още

(12) $$\underbrace{\frac{\sin\theta}{\Xi(\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Xi(\theta)}{\partial\theta}\right)+\lambda\sin^2\theta}_{f(\theta)}=m^2=\underbrace{-\frac{1}{\Phi(\varphi)}\frac{\partial^2\Phi(\varphi)}{\partial\varphi^2}}_{f(\varphi)},$$

където m - константа на разделянето. Така получаваме две ДУ:

(13) $$\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2}+m^2\,\Phi(\varphi)=0, \text{ и}$$

(14) $$\frac{\sin\theta}{\Xi(\theta)}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\,\Xi(\theta)}{d\theta}\right)+\lambda\sin^2\theta=m^2 \qquad \Big|\times\frac{\Xi(\theta)}{\sin^2\theta}, \text{ т.е.}$$

(15) $$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\,\Xi(\theta)}{d\theta}\right)+\left(\lambda-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Xi(\theta)=0$$

Уравнението (13) за $\Phi(\varphi)$ притежава решения $\Phi(\varphi)=C.e^{im\varphi}$, които се нормират по отношение на азимуталния ъгъл φ с равенството

(16) $$\int_0^{2\pi}\Phi_m^*(\varphi)\Phi_n(\varphi)\,d\varphi\equiv\int_0^{2\pi}e^{-im\varphi}e^{in\varphi}\,d\varphi=2\pi\delta_{mn}.$$

Така се доказва, че

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

Решението на другото уравнение (15) може да бъде намерено с полагането $z=\cos\theta$, т.е. $dz=-\sin\theta\, d\theta$, където $-1\le z\le +1$, като за целта то най-напред се записва във вида

(18) $$\frac{d}{-\sin\theta d\theta}\left(\sin\theta\sin\theta\frac{d\,\Xi(\theta)}{-\sin\theta d\theta}\right)+\left(\lambda-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Xi(\theta)=0,$$

с което то добива вида

(19) $$\frac{d}{dz}\left((1-z^2)\frac{d\,\Xi(z)}{dz}\right)+\left[\lambda-\frac{m^2}{1-z^2}\right]\Xi(z)=0\ .$$

Това уравнение при

(20) $\lambda = l(l+1)$ за $l = 0,1,2,..,$

където с l е обозначено т.нар. **орбитално квантово число**,се нарича **присъединено уравнение на Лежандър** и неговите решения се дават с **присъединени функции на Лежандър**

(21) $$P_l^m(z)=(1-z^2)^{\frac{m}{2}}\frac{d^m}{d\,z^m}P_l(z),$$

където $P_l(z)$ са **полиноми на Лежандър**, т.е.

(22) $\Xi(\theta)=P_l^m(\cos\theta)$ при $m = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots.,l$ за $l = 0,1,2,..$

Присъединените функции на Лежандър могат да бъдат нормирани, като се използва условието за ортогоналността им

(23) $$\int_{-1}^{+1}P_l^m(z)\,P_{l'}^m(z)\,dz=\frac{2}{2l+1}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\delta_{ll'},$$

следователно

(24) $$\Xi(\theta)=\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\,P_l^m(\cos\theta).$$

Произведението от ортонормираните функции $\Xi(\theta)$ и $\Phi(\varphi)$ определя сферичните функции на Лаплас $\psi(\theta,\varphi)\equiv Y(\theta,\varphi)$ които, с отчитане на нормировъчните множители, добиват вида

(25) $$Y(\theta,\varphi)=\Xi(\theta).\Phi(\varphi)=\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\,P_l^m(\cos\theta)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}\equiv N_{lm}\,P_l^m(\cos\theta)\,e^{im\varphi},$$

където $N_{lm}=\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}$ е нормировъчен множител.

С отчитането на (7) и (20) получаваме, че енергията на ротатора се квантува:

(26) $$\frac{2I}{\hbar^2}E_l=\lambda_l\equiv l(l+1),$$

откъдето следва

(27) $E_l=\frac{\hbar^2}{2I}l(l+1)$ за $l = 0,1,2,...,$

като очевидно $l = 0$ отпада. Вижда се, че в спектъра на симетричния ротатор има ($2l+1$)-кратно израждане.

Задача ❷: Да се реши уравнението на Шрьодингер за **линеен хармоничен осцилатор**.

Решение:

Класическият линеен хармоничен осцилатор е **квантовомеханична система с една степен на свобода**, движеща се под действието на еластична сила $F=-k.x$. И понеже по дефиниция $F=-\frac{dU(x)}{dx}$, то силовият потенциал, в полето на който се колебае осцилаторът, може да бъде определен от диференциалното уравнение

$\frac{dU(x)}{dx}=k.x$, решението на което се дава с $U(r)=\frac{1}{2}kx^2$. Силовата константа k може да бъде определена по следния начин: колебанията на хармоничен осцилатор се описват най-често с простопериодичен закон за движение $x(t)=A\cos(\omega t+\varphi_0)$, следователно $F=m\ddot{x}=-m\omega^2 x$. От сравняването с $F=-k.x$ следва, че $k=m\omega^2$. По този начин изразът за потенциала добива вида $U(r)=\frac{1}{2}kx^2=\frac{1}{2}m\omega^2 x^2$, а класическата хамилтонова функция на хармоничния осцилатор ще бъде:

$$(1)\qquad H_{кл}=\frac{p^2}{2m}+\frac{m\omega^2 x^2}{2}.$$

Класическият хамилтониан (1) не зависи от времето. За да намерим **стационарните вълнови функции** и **енергетичния спектър** на осцилатора, решаваме **едномерното стационарно уравнение на Шрьодингер**, което се явява уравнение за собствените функции и собствените стойности на операторa на Хамилтон

$$(2)\qquad \hat{H}=\frac{\hat{p}_x{}^2}{2m}+\frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2},$$

където $\hat{p}_x=-i\hbar\frac{d}{dx}$ и $\hat{x}=x$ са оператори на x-проекцията на импулса и на координатата съответно. При това очевидно $\hat{p}_x^2=\hat{p}_x(\hat{p}_x)=-i\hbar\frac{d}{dx}\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)=-\hbar^2\frac{d}{dx}\left(\frac{d}{dx}\right)=-\hbar^2\frac{d^2}{dx^2}$.

След тяхното заместване в (2) операторът на Хамилтон се представя във вида

$$(2^{а})\qquad \hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{m\omega^2x^2}{2}.$$

Така задачата за квантовомеханичния линеен хармоничен осцилатор се свежда до решаването на стационарното уравнение на Шрьодингер

$$(3)\qquad \hat{H}\psi(x)=E\psi(x),$$

което, след заместване на $\hat{H}$ от ($2^{а}$) в (3) добива вида

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{m\omega^2x^2}{2}\psi(x)=E\psi(x)\qquad \bigg|.\left(-\frac{2m}{\hbar^2}\right),\quad \text{или още}$$

$$(4)\qquad \boxed{\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}-\frac{m^2\omega^2x^2}{\hbar^2}\psi(x)+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi(x)=0}.$$

Уравнение (4) е линейно хомогенно ОДУ от II ред с непостоянни коефициенти. Удобно е то да се преобразува чрез подходящи полагания. Нека най-напред отбележим, че величината $\frac{m\omega}{\hbar}$ има размерност $[m^{-2}]$. Тогава величината $x_0=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ ще има размерност $[m^{-1}]$. Затова е удобно в (4) да въведем безразмерна величина ξ, полагайки $\xi=x_0x$, или $\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}.x$, т.е. $\xi^2=\frac{m\omega}{\hbar}.x^2$, следователно $\frac{d\xi}{dx}=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ и можем да извършим смяна на променливата в (4). За целта трябва да изразим $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$ чрез ξ:

$$\frac{d\psi}{dx}=\frac{d\psi}{d\xi}\frac{d\xi}{dx}=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{d\psi}{d\xi};$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}=\frac{d}{dx}\left(\frac{d\psi}{dx}\right)=\frac{d}{dx}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{d\psi}{d\xi}\right)=\frac{d}{d\xi}\frac{d\xi}{dx}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{d\psi}{d\xi}\right)=\frac{d}{d\xi}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{d\psi}{d\xi}\right)\frac{d\xi}{dx}=$$

$$=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{d}{d\xi}\left(\frac{d\psi}{d\xi}\right)\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}=\frac{m\omega}{\hbar}\frac{d}{d\xi}\left(\frac{d\psi}{d\xi}\right)=\frac{m\omega}{\hbar}\frac{d^2\psi}{d\xi^2}.$$

С така намереното представяне $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=\frac{m\omega}{\hbar}\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2}$ заместваме в (4) и получаваме уравнението

$$\frac{m\omega}{\hbar}\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2}-\frac{m\omega}{\hbar}\xi^2\psi(\xi)+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi(\xi)=0 \qquad \Bigg|\cdot\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)$$

$$\Rightarrow \frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2}-\xi^2\psi(\xi)+\frac{2E}{\hbar\omega}\psi(\xi)=0$$

Въвеждаме означението

(*) $\quad \frac{2E}{\hbar\omega}=\lambda,$

където λ - **безразмерен параметър**. Така в новите означения стационарното уравнение на Шрьодингер добива вида

(5) $\quad \boxed{\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2}+(\lambda-\xi^2)\psi(\xi)=0}.$

Уравнение (5) е ЛХОДУ от II ред с непостоянни коефициенти. Функцията $\psi(\xi)$ трябва да бъде еднозначна и ограничена за всяка стойност на ξ, в т.ч. $\xi\to\pm\infty$. Нека намерим „асимптотично” решение на (5) при $\xi\to\pm\infty$. При големи стойности на ξ очевидно $\lambda<<\xi^2$, следователно (5) ще добие вида

(6) $\quad \frac{d^2\psi_\infty(\xi)}{d\xi^2}-\xi^2\psi_\infty(\xi)=0.$

Характеристичното уравнение $\alpha^2-\xi^2=0$ има два корена $\alpha_1=\xi$ и $\alpha_2=-\xi$, така че общото решение на (6) ще се представи във вида

(7) $\quad \psi_\infty(\xi)=C_1e^{\alpha_1\xi}+C_2e^{\alpha_2\xi}=C_1e^{\xi^2}+C_2e^{-\xi^2}$

Но решението със знак „+” в експонентата се изключва, защото неговото присъствие води до разходимост на вълновата функция при $\xi\to\pm\infty$. Така решението в този случай се представя във вида

(8) $\quad \psi_\infty(\xi)=Ce^{-\xi^2}.$

Ето защо, отчитайки (8), в общия случай при $\xi\neq\pm\infty$ е логично да търсим решение от вида

(9) $\quad \psi(\xi)=e^{-a\xi^2}.f(\xi),$

където $f(\xi)$ и a са съответно функция и константа, подлежащи на определяне.

За да бъде решение, функцията (9) трябва да удовлетворява (5) тъждествено. За да проверим дали и кога това е възможно, трябва да определим $\dfrac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2}$:

$$\frac{d\psi}{d\xi} = \frac{d\,f(\xi)}{d\xi}.e^{-a\xi^2} - 2a\xi\, f(\xi).e^{-a\xi^2};$$

$$\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} = \frac{d}{d\xi}\left(\frac{d\psi}{d\xi}\right) = \frac{d}{d\xi}\left(\frac{d\,f(\xi)}{d\xi}.e^{-a\xi^2} - 2a\xi\, f(\xi).e^{-a\xi^2}\right) =$$

$$= \frac{d^2 f(\xi)}{d\xi^2}.e^{-a\xi^2} + (-2a\xi).\frac{df(\xi)}{d\xi}.e^{-a\xi^2} - 2a\, f(\xi).e^{-a\xi^2} - 2a\xi.\frac{df(\xi)}{d\xi}e^{-a\xi^2} + (-2a\xi)^2.f(\xi).e^{-a\xi^2} =$$

$$= \left[\frac{d^2 f(\xi)}{d\xi^2} - 4a\xi.\frac{df(\xi)}{d\xi} - 2a\, f(\xi) + 4a^2\xi^2.f(\xi)\right].e^{-a\xi^2}$$

С така намерената производна $\dfrac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2}$ заместваме в (5) и получаваме

$$\left[\frac{d^2 f(\xi)}{d\xi^2} - 4a\xi.\frac{df(\xi)}{d\xi} - 2a\, f(\xi) + 4a^2\xi^2.f(\xi)\right].e^{-a\xi^2} + (\lambda - \xi^2).f(\xi)e^{-a\xi^2} = 0,$$

откъдето (след деление с $e^{-a\xi^2}$) получаваме

$$\frac{d^2 f(\xi)}{d\xi^2} - 4a\xi.\frac{df(\xi)}{d\xi} - 2a\, f(\xi) + 4a^2\xi^2.f(\xi) + (\lambda - \xi^2).f(\xi) = 0,$$

или още

$$(10)\quad \frac{d^2 f(\xi)}{d\xi^2} - 4a\xi.\frac{df(\xi)}{d\xi} + \{\lambda - 2a + (4a^2 - 1)\xi^2\}.f(\xi) = 0.$$

Нека в горното уравнение изберем константата a по такъв начин, че коефициентът $(4a^2 - 1)$ пред ξ^2 да стане равен на нула. Очевидно това е възможно, ако

$$(11)\quad a = \frac{1}{2}.$$

При тази стойност на a уравнение (10) добива вида

$$(12)\quad \frac{d^2 f(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi.\frac{df(\xi)}{d\xi} + (\lambda - 1).f(\xi) = 0.$$

Ако в това уравнение за $f(\xi)$ заменим формално $(\lambda - 1)$ със $2n$, т.е положим

$$(13)\quad \lambda - 1 = 2n,$$

то придобива вид, идентичен с този на полиномите на Ермит

$$(14)\quad \frac{d^2 f(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi.\frac{df(\xi)}{d\xi} + 2n.f(\xi) = 0.$$

Следователно решението на (14), респективно (12) се дава с **полиноми на Ермит**, т.е. $\boxed{f(\xi) \equiv H_n(\xi)}$. Следователно стационарните вълнови функции на осцилатора, съгласно (9), ще се представят във вида

$$(15)\quad \boxed{\psi_n(\xi) = C_n.e^{-a\xi^2}.f(\xi) \equiv C_n.e^{-\frac{\xi^2}{2}}.H_n(\xi)},$$

където C_n са **нормировъчни константи**.

От (15) се вижда, че вълновите функции $\psi(\xi)$, описващи осцилатора, се определят **единствено** от числото „n”. Ще докажем, че и енергията на осцилатора зависи единствено от „n”. Следователно „n” ще има смисъл на **главно квантово число**.

Нека определим собствените стойности (*енергетичния спектър*) на осцилатора. Както вече видяхме в (13) безразмерният параметър $\lambda = 2n+1$, т.е. той зависи от главното квантово число. Оказва се, че подобен извод може да бъде направен и за енергията E на линейния хармоничен осцилатор, понеже щом $\lambda = \dfrac{2E}{\hbar\omega}$, а $\lambda = \lambda_n$, то очевидно и $\boxed{E = E_n}$, т.е. изпълнено е

$$\lambda_n = \frac{2E_n}{\hbar\omega},$$

откъдето, отчитайки че $\lambda_n = 2n+1$, получаваме

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

с което доказахме, че

$$\boxed{E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)}. \tag{16}$$

<u>Коментар на (16):</u> Очевидно енергетичният спектър на хармоничния осцилатор е **дискретен**. Най-ниска е енергията при $n = 0 \quad \Rightarrow E_0 = \dfrac{\hbar\omega}{2}$, която е прието да се нарича „*енергия на нулевите колебания на осцилатора*”.

От (16) следва още, че енергетичните нива на осцилатора са **еквидистантни**, понеже имат разлика в своите енергии точно $\hbar\omega$. Следователно за да премине осцилаторът в по-високоенергетично (възбудено) състояние, е необходимо той да получи („отвън”) енергия, кратна (или равна) на $\hbar\omega$.

<u>*Резюме*</u>: За всяко „n” има **единствена енергия** E_n, определена от (16), на която съответства единствена (т.е. няма „израждане”) вълнова функция $\psi_n(\xi)$, определена от (15).

За да определим нормировъчната константа C_n в (15), ще използваме, че полиномите на Ермит образуват пълна ортонормирана система от функции в интервала $(-\infty; +\infty)$ с тегло $e^{-\xi^2}$. Условието за ортонормираност на полиномите на Ермит може да бъде записано във вида

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left[e^{-\xi^2}\right].H_n(\xi).H_m(\xi)\, d\xi = 2^n n! \sqrt{\pi}\, \delta_{mn}. \tag{17}$$

Нека приложим условието за нормировка на вълновата функция $\psi(x)$, като отчетем още, че по полагане $\xi = x_0 x$, където $x_0 = \sqrt{\dfrac{m\omega}{\hbar}}$, следователно $dx = \dfrac{d\xi}{x_0}$:

$$\int_{x=-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx \equiv \frac{1}{x_0} \int_{\xi=-\infty}^{+\infty} \psi^*(\xi)\psi(\xi)\, d\xi = 1, \qquad \text{т.е.}$$

$$\frac{1}{x_0}\int_{\xi=-\infty}^{+\infty}\left(C_n.e^{-\frac{\xi^2}{2}}.H_n(\xi)\right)^*\left(C_n.e^{-\frac{\xi^2}{2}}.H_n(\xi)\right)d\xi=\frac{1}{x_0}\int_{\xi=-\infty}^{+\infty}(C_n^*.C_n).e^{-\xi^2}.H_n(\xi).H_n(\xi)\,d\xi=$$

$$=\frac{1}{x_0}|C_n|^2\left\{\int_{\xi=-\infty}^{+\infty}e^{-\xi^2}.H_n^2(\xi)\,d\xi\right\}=1.$$

Ако вземем под внимание, че интегралът в горното равенство може да се изрази с помощта на условието за ортонормираност на полиномите на Ермит (17) за случая $m=n$, ще имаме

$$\frac{1}{x_0}|C_n|^2(2^n n!\sqrt{\pi})=1,$$

откъдето получаваме равенството

$$(18)\qquad |C_n|=\sqrt{x_0}\sqrt{\frac{1}{2^n n!\sqrt{\pi}}}=\sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\sqrt{\frac{1}{2^n n!}}\ .$$

Накрая, отчитайки горното, както и това, че по полагане $\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}.x$, както и че $\frac{\xi^2}{2}=\frac{m\omega}{2\hbar}x^2$, можем да запишем (15) във вида

(19) $\boxed{\psi_n(x)=\sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\sqrt{\frac{1}{2^n n!}}.e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}.\,H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}.x\right)}$ - **нормирани стационарни вълнови функции** на осцилатора.

Задача ❸: Да се реши уравнението на Шрьодингер за движение на електрон в кулоново поле (*поле с кулонов потенциал*).

Решение:

А) Постановка на задачата: Движението на електрон (e^-) във водороден атом представлява движение на заредена частица в поле с централна симетрия. Когато пълната енергия на частица в силово поле е $E>0$, движението на тази частица е неограничено (*инфинитно*), т.е. между частицата и силовия център липсва свързано състояние. Но когато пълната енергия на частицата (*електрона в полето на ядрото*) е $E<0$, то движението на електрона е ограничено (финитно) в областта $r_{\min}\le r_{e^-}\le r_{\max}$. Ще разглеждаме само финитните движения (*състояния*) на електрона в атома на водорода. Оказва се, че за $E<0$ тези състояния имат дискретен енергетичен спектър.

Между електрона и положително зареденото ядро действа кулонова сила на привличане, отговаряща на кулонов потенциал

$$(1)\qquad U(r)=-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}.$$

Тогава за водородния атом ефективният потенциал ще бъде

$$(2)\qquad U_{eff}(r)=U(r)+U_{ЦБ}(r)=U(r)+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}=-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2},$$

а радиалното уравнение на Шрьодингер

(3) $$\frac{d^2 u(r)}{d r^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-U_{eff}(r)\right]u(r)=0,$$

след заместване на $U_{eff}(r)$ ще добие вида

(4) $$\frac{d^2 u(r)}{d r^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-\left(-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2}\right)\right]u(r)=0.$$

Ако за удобство означим $k_0=\dfrac{1}{4\pi\varepsilon_0}$, то

(5) $$\frac{d^2 u(r)}{d r^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}u(r)+\frac{2mk_0 Ze^2}{\hbar^2}\frac{1}{r}u(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}u(r)=0.$$

Нека отбележим, че в приведените по-горе формули величината „m” означава приведена маса.

Б) Решаване на РУШ (радиалното уравнение на Шрьодингер)

Нека най-напред представим уравнение (5) в „безразмерен” формат. За целта нека определим размерността на величината

(6) $$z_0=\frac{mk_0e^2}{\hbar^2}.$$

За целта използваме, че $[\varepsilon_0]=\dfrac{C^2}{N.m^2}$, т.е. $[k_0]=\dfrac{N.m^2}{C^2}$, $[\hbar]^2=(J.s)^2\equiv J^2s^2$,

следователно

(7) $$[z_0]=\frac{[m][k_0][e^2]}{[\hbar^2]}=\frac{kg.C^2}{J^2s^2}\frac{N.m^2}{C^2}=\underbrace{\left(\frac{kg.m}{s^2}\right)}_{N}\frac{N.m}{J^2}=\frac{N^2.m}{(N.m)^2}=\frac{m}{m^2}=m^{-1}.$$

Тогава очевидно величината

(8) $$x_0=\frac{1}{z_0}=\frac{\hbar^2}{mk_0e^2}$$

ще има размерност $[x_0]=m$. Нека тогава положим

(9) $$x=x_0\rho,$$

където величината ρ е безразмерно „разстояние”. Извършваме смяна на променливите

$$\frac{d}{dx}=\frac{1}{x_0}\frac{d}{d\rho};\qquad \frac{d^2}{dx^2}=\frac{d}{dx}\left(\frac{d}{dx}\right)=\frac{1}{x_0}\frac{d}{d\rho}\left(\frac{1}{x_0}\frac{d}{d\rho}\right)=\frac{1}{x_0^{\ 2}}\frac{d^2}{d\rho^2},$$

с което уравнение (5) добива вида

$$\frac{1}{x_0^2}\frac{d^2 u(\rho)}{d\rho^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}u(\rho)+\frac{2Z}{\left(\dfrac{\hbar^2}{mk_0e^2}\right)}\frac{1}{(x_0\rho)}u(\rho)-\frac{l(l+1)}{(x_0\rho)^2}u(\rho)=0,$$ или още

$$\frac{1}{x_0^2}\frac{d^2 u(\rho)}{d\rho^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}u(\rho)+\frac{2Z}{x_0^{\ 2}}\frac{1}{\rho}u(\rho)-\frac{l(l+1)}{x_0^{\ 2}\rho^2}u(\rho)=0 \qquad \Big|\times x_0^{\ 2},$$ т.е.

(10) $$\frac{d^2 u(\rho)}{d\rho^2}+\frac{2mx_0^2E}{\hbar^2}u(\rho)+\frac{2Z}{\rho}u(\rho)-\frac{l(l+1)}{\rho^2}u(\rho)=0.$$

Нека в (10) въведем обозначението

(11) $\varepsilon = \dfrac{2mx_0^2 E}{\hbar^2}$,

с което то добива вида

(12) $\dfrac{d^2 u(\rho)}{d\rho^2} + \left[\varepsilon + \dfrac{2Z}{\rho} - \dfrac{l(l+1)}{\rho^2}\right] u(\rho) = 0$.

Логично е решението на РУШ (12) да търсим във вида

(13) $u(\rho) \approx u_0(\rho).u_\infty(\rho)$ за $\rho \neq 0$ и $\rho \neq \infty$,

където:

- ❖ $u_0(\rho)$ - частно решение на (12) при $\rho \to 0$;
- ❖ $u_\infty(\rho)$ - частно решение на (12) при $\rho \to \infty$.

Нека най-напред намерим „асимптотичните” решения $u_\infty(\rho)$ и $u_0(\rho)$:

А) При $\rho \to \infty$ уравнението (12) добива вида

(14) $\dfrac{d^2 u_\infty(\rho)}{d\rho^2} + \varepsilon u_\infty(\rho) = 0$.

Корените на характеристичното уравнение $\alpha^2 + \varepsilon = 0$ на горното ЛХОДУ са $\alpha_{1,2} = \pm\sqrt{-\varepsilon}$. И понеже разглеждаме атом (*т.е. свързано състояние на ядро и електрон, и имаме финитно движение*), то очевидно $E < 0$, следователно $\varepsilon = \dfrac{2mx_0^2 E}{\hbar^2} < 0$, т.е. $\varepsilon = -|\varepsilon|$.

Така корените на характеристичното уравнение

$\alpha_{1,2} = \pm\sqrt{-\varepsilon} = \pm\sqrt{-(-|\varepsilon|)} \equiv \pm\sqrt{|\varepsilon|}$, т.е. $\alpha_1 = +\sqrt{|\varepsilon|}$ и $\alpha_2 = -\sqrt{|\varepsilon|}$

се оказват реални величини, и двете частни решения на (13) могат да се представят във вида

(15[а]) $u_\infty(\rho)_1 = e^{\alpha_1 \rho}$, и (15[б]) $u_\infty(\rho)_2 = e^{\alpha_2 \rho}$.

Първото от двете отхвърляме като разходящо при $\rho \to \infty$, следователно остава второто

(16) $\underbrace{u_\infty(\rho)}_{\rho\to\infty} = e^{-\alpha\rho}$, където $\alpha = +\sqrt{|\varepsilon|}$.

Б) При $\rho \to 0$ в уравнението (12) доминира членът $\dfrac{l(l+1)}{\rho^2}$, и то добива вида

(17) $\dfrac{d^2 u_0(\rho)}{d\rho^2} - \dfrac{l(l+1)}{\rho^2} u_0(\rho) = 0$.

При $\rho \neq 0$ очевидно

(18) $\rho^2 \dfrac{d^2 u_0(\rho)}{d\rho^2} - l(l+1) u_0(\rho) = 0$.

Това е ЛХОДУ от II ред с непостоянни коефициенти от типа „уравнение на Ойлер”, което се свежда до ЛХОДУ с постоянни коефициенти посредством полагането

(19) $\rho = e^{-\xi}$, при което $d\rho = -e^{-\xi} d\xi$.

Както вече бе показано в предходна задача при това полагане диференциалните оператори се променят както следва

☞ $\dfrac{d}{d\rho}=-e^{\xi}\dfrac{d}{d\xi}$ и $\dfrac{d^2}{d\rho^2}=e^{2\xi}\left(\dfrac{d^2}{d\xi^2}+\dfrac{d}{d\xi}\right)$.

В следващите разглеждания трябва да се има предвид обстоятелството, че при направеното полагане (18) случаят $\rho\to 0 \quad\Leftrightarrow\quad \xi\to\infty$. Така получаваме

$$\underbrace{e^{-2\xi}}_{\rho^2}e^{2\xi}\left(\frac{d^2}{d\xi^2}+\frac{d}{d\xi}\right)u_0(\xi)-l(l+1)u_0(\xi)=0,\text{ или още}$$

(20) $$\frac{d^2u_0(\xi)}{d\xi^2}+\frac{du_0(\xi)}{d\xi}-l(l+1)u_0(\xi)=0.$$

Характеристичното уравнение на това ЛХОДУ с постоянни (вече) коефициенти има корени

(21[а]) $\alpha_1=l$ и (21[б]) $\alpha_2=-(l+1)$.

С отчитане на полагането $\rho=e^{-\xi}$ (т.е. $\xi=-\ln\rho$) двете частни решения на (20) се записват съответно във вида

(22) $$\left|\begin{array}{l} u_0(\xi)=e^{\alpha_1\xi}=e^{l\xi}=e^{-l\ln\rho}=e^{\ln\rho^{-l}}\equiv\rho^{-l} \\ u_0(\xi)=e^{\alpha_2\xi}=e^{-(l+1)\xi}=e^{(l+1)\ln\rho}=e^{\ln\rho^{l+1}}\equiv\rho^{l+1} \end{array}\right. .$$

От тези две частни решения при $\rho\to 0$ неразходящо е само второто, което ни дава основание да запишем, че решението за разглеждания случай $\rho\to 0$ е

(23) $$\underbrace{u_0(\xi)}_{\rho\to 0}=\rho^{l+1}.$$

Заместваме с така намерените решения (16) и (23) в (13)

(24) $$u(\rho)\approx u_0(\rho).u_\infty(\rho)=\rho^{l+1}e^{-\alpha\rho},$$

или още

(25) $$u(\rho)=f(\rho)\rho^{l+1}e^{-\alpha\rho},$$

където $f(\rho)$ е функция, подлежаща на определяне. Нека изразим $\dfrac{du}{d\rho}$ и $\dfrac{d^2u}{d\rho^2}$, и ги заместим в (12):

$$\frac{du}{d\rho}=\frac{df}{d\rho}\rho^{l+1}e^{-\alpha\rho}+f(l+1)\rho^le^{-\alpha\rho}-\alpha f\rho^{l+1}e^{-\alpha\rho}.$$

$$\frac{d^2u}{d\rho^2}=\frac{d^2f}{d\rho^2}\rho^{l+1}e^{-\alpha\rho}+(l+1)\rho^l\frac{df}{d\rho}e^{-\alpha\rho}-\alpha\frac{df}{d\rho}\rho^{l+1}e^{-\alpha\rho}+(l+1)\rho^l\frac{df}{d\rho}e^{-\alpha\rho}+$$

$$+l(l+1)\rho^{l-1}f(\rho)e^{-\alpha\rho}-\alpha(l+1)f(\rho)\rho^le^{-\alpha\rho}-\alpha\frac{df}{d\rho}\rho^{l+1}e^{-\alpha\rho}-$$

$$-\alpha(l+1)f(\rho)\rho^le^{-\alpha\rho}+\alpha^2f(\rho)\rho^{l+1}e^{-\alpha\rho}=$$

$$=\frac{d^2f}{d\rho^2}\rho^{l+1}e^{-\alpha\rho}+2(l+1)\rho^l\frac{df}{d\rho}e^{-\alpha\rho}-2\alpha\frac{df}{d\rho}\rho^{l+1}e^{-\alpha\rho}-$$

$$-2\alpha(l+1)f(\rho)\rho^le^{-\alpha\rho}+l(l+1)\rho^{l-1}f(\rho)e^{-\alpha\rho}+\alpha^2f(\rho)\rho^{l+1}e^{-\alpha\rho}.$$

Заместваме така намерената производна $\dfrac{d^2u}{d\rho^2}$ в (12), т.е. в

$$\frac{d^2u(\rho)}{d\rho^2}+\left[\varepsilon+\frac{2Z}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]u(\rho)=0,$$

като същевременно съкращаваме $e^{-\alpha\rho}\neq 0$:

$$\frac{d^2f}{d\rho^2}\rho^{l+1}+2(l+1)\rho^l\frac{df}{d\rho}-2\alpha\frac{df}{d\rho}\rho^{l+1}-2\alpha(l+1)\rho^l f(\rho)+l(l+1)\rho^{l-1}f(\rho)+\alpha^2\rho^{l+1}f(\rho)+$$

$$+\left[\varepsilon+\frac{2Z}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]\rho^{l+1}f(\rho)=0,$$ или още

$$\frac{d^2f}{d\rho^2}\rho^{l+1}+\rho^l[2(l+1)-2\alpha\rho]\frac{df}{d\rho}+\rho^l\left[-2\alpha(l+1)+\frac{l(l+1)}{\rho}+\alpha^2\rho+\varepsilon\rho+2Z-\frac{l(l+1)}{\rho}\right]f(\rho)=0$$

След съкращения и разделяне с $\rho^l\neq 0$ получаваме

(26) $$\rho\frac{d^2f}{d\rho^2}+[2(l+1)-2\alpha\rho]\frac{df}{d\rho}+[\alpha^2\rho-2\alpha(l+1)+\varepsilon\rho+2Z]f(\rho)=0.$$

Тук можем да отчетем още, че съгласно (16) $\alpha^2=-\varepsilon$, следователно $\alpha^2\rho=-\varepsilon\rho$, с отчитането на което (26) добива вида

(27) $$\rho\frac{d^2f}{d\rho^2}+[2(l+1)-2\alpha\rho]\frac{df}{d\rho}+[2Z-2\alpha(l+1)]f(\rho)=0.$$

Нека в (27) положим

(28) $\eta=2\alpha\rho,$ т.е. $\rho=\dfrac{\eta}{2\alpha},$ следователно $d\rho=\dfrac{d\eta}{2\alpha}.$

С направеното полагане изразяваме диференциалните оператори

☞ $\dfrac{d}{d\rho}=2\alpha\dfrac{d}{d\eta},$ и $\dfrac{d^2}{d\rho^2}=\dfrac{d}{d\rho}\left(\dfrac{d}{d\rho}\right)=2\alpha\dfrac{d}{d\eta}\left(2\alpha\dfrac{d}{d\eta}\right)=(2\alpha)^2\dfrac{d^2}{d\eta^2}.$

След заместване в (27) получаваме

(29) $$\frac{\eta}{2\alpha}(2\alpha)^2\frac{d^2f(\eta)}{d\eta^2}+[2l+2-\eta](2\alpha)\frac{df(\eta)}{d\eta}+[2Z-2\alpha(l+1)]f(\eta)=0,$$

или още

(30) $$2\alpha\eta\frac{d^2f(\eta)}{d\eta^2}+[(2l+1)+1-\eta](2\alpha)\frac{df(\eta)}{d\eta}+2[Z-\alpha(l+1)]f(\eta)=0.$$

Ако разделим двете страни на това уравнение с 2α, получаваме

(31) $$\eta\frac{d^2f(\eta)}{d\eta^2}+[(2l+1)+1-\eta]\frac{df(\eta)}{d\eta}+\left[\frac{Z}{\alpha}-(l+1)\right]f(\eta)=0.$$

Нека положим

(32) $$\frac{Z}{\alpha}=n.$$

Тогава

(33) $$\frac{Z}{\alpha}-(l+1)=n-(l+1)=(n+l)-(l+l+1)\equiv(n+l)-(2l+1).$$

Заместваме (33) в (31)

(34) $$\eta\frac{d^2 f(\eta)}{d\eta^2}+[(2l+1)+1-\eta]\frac{df(\eta)}{d\eta}+[(n+l)-(2l+1)]f(\eta)=0.$$

Уравнение (34) е от типа уравнение за присъединените полиноми на Лагер, имащо вида

(35) $$x\frac{d^2W(x)}{dx^2}+(a+1-x)\frac{dW(x)}{dx}+(n-a)W(x)=0.$$

Решението на (35) се дава с присъединените полиноми на Лагер

(36) $$W(x)\equiv L_n^a(x)=\frac{d^a}{dx^a}L_n(x),$$

където

(37) $$L_n(x)=\frac{e^x}{n!}\frac{d^n}{dx^n}(x^n e^{-x})$$

са полиноми на Лагер, удовлетворяващи уравнението

(38) $$x\frac{d^2W(x)}{dx^2}+(1-x)\frac{dW(x)}{dx}+nW(x)=0.$$

От приведената в (35), (36), (37) и (38) математическа справка става ясно, че решението на (34) се изразява именно чрез присъединените полиноми на Лагер. А още по-конкретно, от съотнасянето на (34) и (35) се установяват съотношенията

$$(2l+1)\to a \qquad \text{и} \qquad (n+l)\to n,$$

следователно детайлизираното представяне за решението на (34) има вида

(39) $$f(\eta)=L_{n+l}^{2l+1}(\eta).$$

Щом това е така, следва да отчетем, че според (28) $\eta=2\alpha\rho$, т.е. $\rho=\dfrac{\eta}{2\alpha}$, и следователно съгласно (25) ще имаме

$$u(\rho)=f(\rho)\rho^{l+1}e^{-\alpha\rho} \quad\Rightarrow\quad u(\eta)=f(\eta)\frac{\eta^{l+1}}{(2\alpha)^{l+1}}e^{-\alpha\frac{\eta}{2\alpha}}, \qquad \text{т.е.}$$

(40) $$u(\eta)=const.\eta^{l+1}e^{-\frac{\eta}{2}}.L_{n+l}^{2l+1}(\eta).$$

Тогава $$R(\rho)=\frac{u(\rho)}{\rho} \quad\Rightarrow\quad R_{nl}(\eta)=\frac{u(\eta)}{\left(\dfrac{\eta}{2\alpha}\right)}=A_{nl}\eta^l e^{-\frac{\eta}{2}}.L_{n+l}^{2l+1}(\eta).$$

И така, решението на РУШ за водороден атом бе получено във вида

(41) $$R_{nl}(\eta)=A_{nl}\eta^l e^{-\frac{\eta}{2}}.L_{n+l}^{2l+1}(\eta),$$

където константата A_{nl} се определя от условието за нормировка на вълновата функция.

Остана да определим собствените стойности (*енергиите*) E_n на електрона във водородния атом.

Съгласно полагането (32) $\dfrac{Z}{\alpha}=n$. Но съгласно (16) $\alpha^2=-\varepsilon$, а според (11) $\varepsilon=\dfrac{2mx_0^2E}{\hbar^2}$, където съгласно (8) $x_0=\dfrac{1}{z_0}=\dfrac{\hbar^2}{mk_0e^2}$, а $k_0=\dfrac{1}{4\pi\varepsilon_0}$. Обобщавайки всичко това получаваме

(42) $\dfrac{Z^2}{\alpha^2}=n^2$, т.е. $\dfrac{Z^2}{-\varepsilon_n}=n^2$,

където сме „индексирали" величината ε поради очевидната ѝ зависимост от „n". По-нататък следва

(43) $\varepsilon_n=-\dfrac{Z^2}{n^2}$, т.е. (44) $\dfrac{2mx_0^2}{\hbar^2}E_n=-\dfrac{Z^2}{n^2}$,

откъдето

(45) $$E_n=-\frac{Z^2}{n^2}\frac{\hbar^2}{2mx_0^2}=-\frac{Z^2}{n^2}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\left(\dfrac{\hbar^2}{mk_0e^2}\right)^2}=-\frac{Z^2}{n^2}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{m^2k_0{}^2e^4}{\hbar^4}=-\frac{mZ^2k_0{}^2e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}=$$

$$=-\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2}\left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\frac{1}{n^2}=-\frac{mZ^2e^4}{32\pi^2\varepsilon_0{}^2\hbar^2}\frac{1}{n^2}.$$

И така дискретният енергетичен спектър на електрона във водородния атом се дава с

(46) $$E_n=-\frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0{}^2\hbar^2}\frac{1}{n^2},$$

където е отчетено, че за водороден атом $Z=1$.

При извършването на квантов преход от по-високо енергетично ниво E_n към по-ниско енергетично ниво E_m се излъчва фотон с енергия $\hbar\omega$, т.е.

(47) $E_n-E_m=\hbar\omega.$

Ако заместим енергиите на двете енергетични състояния от (46), получаваме за честотата на излъчения фотон

(48) $$\nu=\frac{\omega}{2\pi}=\frac{E_n-E_m}{2\pi\hbar}=\frac{me^4}{64\pi^3\varepsilon_0{}^2\hbar^3}\left(\frac{1}{m^2}-\frac{1}{n^2}\right)=R\left(\frac{1}{m^2}-\frac{1}{n^2}\right),$$

където с

(49) $$R=\frac{me^4}{64\pi^3\varepsilon_0{}^2\hbar^3}$$

е означена т.нар. константа на Ридберг.

Нека се опитаме да установим, използвайки намереното решение на РУШ, как електронът (*електронната плътност*) е локализиран(а) в атома на водорода. Съгласно (41) $R_{nl}(\eta)=A_{nl}\eta^le^{-\frac{\eta}{2}}.L_{n+l}^{2l+1}(\eta)$, където членът η^l описва поведението на радиалната вълнова функция при $\eta\to 0$, а членът $e^{-\frac{\eta}{2}}$ - при големи разстояние. Следователно с отдалечаването от центъра на ядрото на водородния атом радиалната вълнова функция се изменя като $R_{nl}(\eta) \approx e^{-\frac{\eta}{2}}$. Степенният показател в експонентата може да бъде представен по следния начин: според (28) $\eta = 2\alpha\rho$, т.е. $\frac{\eta}{2} = \rho\alpha$, а съгласно (32) $\alpha = \frac{Z}{n}$. Ако отчетем и това, че съгласно (9) $\rho = \frac{x}{x_0}$, то очевидно $\frac{\eta}{2} = \frac{x}{x_0}\frac{Z}{n}$. Ако заместим това представяне за степенния показател в експонентата, получаваме

(50) $\quad R_{nl}(\eta) \approx e^{-\frac{Z}{nx_0}x}$.

Понеже плътността на вероятността се дава с $|R_{nl}(\eta)|^2$, то очевидно тази плътност ще бъде пропорционална на

(51) $\quad |R_{nl}(\eta)|^2 \approx e^{-\frac{2Z}{nx_0}x}$.

Вижда се, че на разстояние $r_0 = \frac{nx_0}{2Z}$ плътността на вероятността намалява е-пъти, следователно величината r_0 характеризира размера на атома на водорода. За атома на водорода ($Z = 1$) в основно състояние ($n = 1$) очевидно този размер е

(52) $\quad r_0 = \frac{nx_0}{2Z} \equiv \frac{x_0}{2} = \frac{1}{2}\frac{\hbar^2}{mk_0e^2} = \frac{1}{2}\frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2} = \frac{2\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}$.

Нека направим числова оценка: при $h = 6{,}63 \cdot 10^{-34}\ J.s$, $\varepsilon_0 = 8{,}85 \cdot 10^{-12}\ F/m$, $e = 1{,}6 \cdot 10^{-19}\ C$ и $m \approx 9{,}1 \cdot 10^{-31}\ kg$ по горната формула (52) получаваме

(53) $\quad r_0 = \frac{2\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2} \approx 0{,}25\ \overset{o}{A}$.

Задача ❹: Да се реши уравнението на Шрьодингер за частица с момент $l = 0$, движеща се в поле с потенциал $U(r) = -U_0 e^{-\frac{r}{a}}$, където $U_0 > 0,\ a > 0$.

Решение: Имаме стационарна задача (*липсва зависимост от времето* t). Движението на частицата се извършва в поле с централна симетрия, следователно е удачно да представим вълновата функция в сферични координати

(1) $\quad \psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y(\theta,\varphi)$, $\quad \left| \begin{array}{l} 0 < \rho < \infty \\ 0 \le \theta \le \pi \\ 0 \le \varphi \le 2\pi \end{array} \right.$

За да намерим радиалната част $R(r)$ на вълновата функция $\psi(r,\theta,\varphi)$, трябва да решим радиалното уравнение на Шрьодингер

(*) $\quad \frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - U(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right]R(r) = 0$, в което членът $\dfrac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} = U_{ЦБ}(r)$ представлява т.нар. **центробежна потенциална енергия**. В случая $\dfrac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \equiv 0$, понеже по условие моментът (*орбиталното квантово число*) $l = 0$. След заместване на потенциала $U(r) = -U_0\, e^{-\frac{r}{a}}$ в (*), получаваме

(2) $$\frac{d^2 R(r)}{d r^2} + \frac{2}{r}\frac{dR(r)}{d r} + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E + U_0\, e^{-\frac{r}{a}}\right] R(r) = 0.$$

За да решим това уравнение, правим субституция в него, полагайки

(3) $$R(r) = \frac{u(r)}{r},$$

което налага и производните $\dfrac{dR(r)}{d r}$ и $\dfrac{d^2 R(r)}{d r^2}$ да бъдат изразени чрез „новата" функция $u(r)$, а именно:

$$\frac{dR(r)}{d r} = \frac{1}{r}\frac{d\,u(r)}{d r} - \frac{1}{r^2}u(r);$$

$$\frac{d^2 R(r)}{d r^2} = \frac{d}{d r}\left(\frac{1}{r}\frac{d\,u(r)}{d r} - \frac{1}{r^2}u(r)\right) = \frac{1}{r}\frac{d^2 u(r)}{d r^2} - \frac{1}{r^2}\frac{d\,u(r)}{d r} - \frac{1}{r^2}\frac{d\,u(r)}{d r} - \frac{-2}{r^3}u(r) =$$

$$= \frac{1}{r}\frac{d^2 u(r)}{d r^2} - \frac{2}{r^2}\frac{d\,u(r)}{d r} + \frac{2}{r^3}u(r).$$

Заместваме $\dfrac{dR(r)}{d r}$ и $\dfrac{d^2 R(r)}{d r^2}$ в (2) и получаваме

$$\frac{1}{r}\frac{d^2 u(r)}{d r^2} - \frac{2}{r^2}\frac{d\,u(r)}{d r} + \frac{2}{r^3}u(r) + \frac{2}{r}\left(\frac{1}{r}\frac{d\,u(r)}{d r} - \frac{1}{r^2}u(r)\right) + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E + U_0\, e^{-\frac{r}{a}}\right]\frac{u(r)}{r} = 0,$$

$$\frac{1}{r}\frac{d^2 u(r)}{d r^2} - \frac{2}{r^2}\frac{d\,u(r)}{d r} + \frac{2}{r^3}u(r) + \frac{2}{r^2}\frac{d\,u(r)}{d r} - \frac{2}{r^3}u(r) + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E + U_0\, e^{-\frac{r}{a}}\right]\frac{u(r)}{r} = 0, \text{ или}$$

$$\frac{1}{r}\frac{d^2 u(r)}{d r^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E + U_0\, e^{-\frac{r}{a}}\right]\frac{u(r)}{r} = 0 \qquad \big|.\,r$$

(4) $$\frac{d^2 u(r)}{d r^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E + U_0\, e^{-\frac{r}{a}}\right] u(r) = 0.$$

За да решим това ОДУ, правим смяна на независимата променлива, полагайки

$$\xi = e^{-\frac{r}{2a}},$$

откъдето определяме $\dfrac{d\xi}{d r} = -\dfrac{1}{2a}e^{-\frac{r}{2a}} \equiv -\dfrac{1}{2a}\xi$. Нека отбележим още, че тъй като $e^{-\frac{r}{a}} = e^{-\left(\frac{r}{2a}\right).2} = \left(e^{-\frac{r}{2a}}\right)^2 \equiv \xi^2$, то очевидно $U_0\, e^{-\frac{r}{a}} \to U_0\,\xi^2$.

За да извършим коректна смяна на променливата, трябва още да изразим $\frac{d^2 u(r)}{d r^2}$ посредством ξ:

$$\frac{d u(r)}{d r} = \frac{d u(\xi)}{d\xi}\frac{d\xi}{d r} = \frac{d u(\xi)}{d\xi}\left(-\frac{1}{2a}\xi\right) = -\frac{1}{2a}\frac{d u(\xi)}{d\xi}\xi,$$

$$\frac{d^2 u(r)}{d r^2} = \frac{d}{d r}\left(\frac{d u(r)}{d r}\right) = \frac{d}{d r}\left(-\frac{1}{2a}\frac{d u(\xi)}{d\xi}\xi\right) = \frac{d}{d\xi}\left(-\frac{1}{2a}\frac{d u(\xi)}{d\xi}\xi\right)\frac{d\xi}{d r} =$$

$$= \frac{d}{d\xi}\left(-\frac{1}{2a}\frac{d u(\xi)}{d\xi}\xi\right)\frac{d\xi}{d r} = \left(-\frac{1}{2a}\frac{d^2 u(\xi)}{d\xi^2}\xi - \frac{1}{2a}\frac{d u(\xi)}{d\xi}\right)\left(-\frac{1}{2a}\xi\right) =$$

$$= \frac{1}{4a^2}\left(\frac{d^2 u(\xi)}{d\xi^2}\xi^2 + \frac{d u(\xi)}{d\xi}\xi\right).$$

С така намерената втора производна $\frac{d^2 u(r)}{d r^2} = \frac{1}{4a^2}\left(\frac{d^2 u(\xi)}{d\xi^2}\xi^2 + \frac{d u(\xi)}{d\xi}\xi\right)$ заместваме в (4), и отчитайки, че $u(r) \to u(\xi)$, а $U_0 e^{-\frac{r}{a}} \to U_0 \xi^2$, получаваме

$$\frac{1}{4a^2}\left(\frac{d^2 u(\xi)}{d\xi^2}\xi^2 + \frac{d u(\xi)}{d\xi}\xi\right) + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E + U_0 \xi^2\right]u(\xi) = 0,$$ или още

$$\frac{1}{4a^2}.\xi^2.\frac{d^2 u(\xi)}{d\xi^2} + \frac{1}{4a^2}.\xi.\frac{d u(\xi)}{d\xi} + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E + U_0 \xi^2\right]u(\xi) = 0 \qquad \Bigg|.\left(\frac{4a^2}{\xi^2}\right)$$

(5) $$\frac{d^2 u(\xi)}{d\xi^2} + \frac{1}{\xi}\frac{d u(\xi)}{d\xi} + \left[\frac{8a^2 mE}{\hbar^2}\frac{1}{\xi^2} + \frac{8a^2 mU_0}{\hbar^2}\right]u(\xi) = 0.$$

Сравняваме уравнение (5) с уравнението на Бесел

(6) $$\frac{d^2 f(\xi)}{d\xi^2} + \frac{1}{\xi}\frac{d f(\xi)}{d\xi} + \left[\lambda^2 - q^2\frac{1}{\xi^2}\right] f(\xi) = 0.$$

Очевидно уравнение (5) $\equiv$ уравнение (6), ако означим (*положим*)

$$\lambda^2 = \frac{8a^2 mU_0}{\hbar^2} \text{ и } q^2 = -\frac{8a^2 mE}{\hbar^2},$$

като следва да отбележим, че $q^2 > 0$, понеже при финитно движение в поле с централна симетрия пълната енергия е отрицателна ($E < 0$).

От представянето $q^2 = -\frac{8a^2 mE}{\hbar^2}$ следва $E = -\frac{\hbar^2}{8a^2 m}q^2$, т.е. енергетичният спектър зависи от числото „q”, и следователно този спектър е дискретен (енергията се квантува).

Нека продължим с намирането на радиалната вълнова функция на частицата, явяваща се решение на (5), т.е. (6) след направените полагания. Общото решение на уравнението на Бесел е линейна комбинация от функциите на Бесел $J_q(\lambda\xi)$ и Нойман $N_q(\lambda\xi)$, т.е.

(7) $$f(\xi) = C_1.J_q(\lambda\xi) + C_2.N_q(\lambda\xi).$$

Функцията на Нойман, обаче, има полюс (*разходимост*) при $\xi = 0$, т.е. при $r \to \infty$ (*понеже* $\xi = e^{-\frac{r}{2a}}$, $\Rightarrow$ $0 = e^{-\frac{\infty}{2a}}$). А тъй като искаме $f(\xi)$ да е ограничена (*т.е. неразходяща*), то очевидно трябва да елиминираме присъствието на функцията на Нойман $N_q(\lambda\xi)$, т.е. трябва в (7) да приемем $C_2 = 0$. Тогава решението на (6) ще добие вида

(8) $f(\xi) \equiv u(\xi) = C_1.J_q(\lambda\xi)$.

Отчитайки, че $\xi = e^{-\frac{r}{2a}}$, и тъй като по полагане радиалната част $R(r)$ на вълновата функция се изразява чрез $u(r)$ посредством равенството (3), а именно $R(r) = \dfrac{u(r)}{r}$, т.е. $u(r) = r.R(r)$, то ще имаме

$$r.R(r) = C_1.J_q(\lambda e^{-\frac{r}{2a}}),\text{ т.е.}$$

(9) $$R(r) = \frac{C_1.J_q(\lambda e^{-\frac{r}{2a}})}{r}.$$

При $r \to 0$ имаме $e^{-\frac{r}{2a}} \to 1$, следователно $R(0) \to \dfrac{C_1.J_q(\lambda)}{r}$, откъдето следва, че за да има отношението $\dfrac{J_q(\lambda)}{r}$ крайна стойност при $r \to 0$, трябва

(10) $J_q(\lambda) = 0$.

От равенство (10), знаейки нулите на функцията на Бесел $J_q(\lambda)$, и отчитайки, че $\boxed{\lambda^2 = \dfrac{8a^2mU_0}{\hbar^2}}$ и $\boxed{q^2 = -\dfrac{8a^2mE}{\hbar^2}}$, получаваме **спектъра** от енергетични стойности на частицата в полето с централна симетрия, имащо потенциал $U(r) = -U_0 e^{-\frac{r}{a}}$.

Допълнения:

Д1) Опростен метод за получаване на РУШ:

(1) $\hat{H}\psi = E\psi$, т.е.

(2) $$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi = E\psi,$$

(3) $$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r\psi - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\Delta_{\theta,\varphi}\psi + U\psi = E\psi.$$

Но операторът

(4) $-\hbar^2\Delta_{\theta,\varphi} \equiv \hat{L}^2$,

където $\hat{L}^2$ е операторът на квадрата на момента на импулса. Този оператор, както е известно, удовлетворява следното уравнение за собствените стойности и собствените функции $\hat{L}^2\psi = L^2\psi$, т.е.

(5) $-\hbar^2\Delta_{\theta,\varphi}\psi = L^2\psi$,

където с L^2 са обозначени собствените стойности на този оператор. Горното уравнение може да бъде записано още във вида

(6) $$\Delta_{\theta,\varphi}\psi + \frac{L^2}{\hbar^2}\psi = 0.$$

Чрез полагането $z = \cos\theta,\ dz = -\sin\theta\, d\theta$ уравнение (6) може да бъде записано във вида

(7) $$\frac{d}{dz}\left[(1-z^2)\frac{d\psi}{dz}\right] + \frac{L^2}{\hbar^2}\psi = 0.$$

То се редуцира до уравнението за полиномите на Лежандър

(8) $$\frac{d}{dz}\left[(1-z^2)\frac{d\psi}{dz}\right] + l(l+1)\psi = 0,$$

ако положим

(9) $$\frac{L^2}{\hbar^2} = l(l+1), \qquad \text{т.е.} \qquad L^2 = \hbar^2 l(l+1),$$

откъдето, замествайки в (5), получаваме

(10) $$-\hbar^2\Delta_{\theta,\varphi}\psi = \hbar^2 l(l+1)\psi.$$

Остава да заместим $-\hbar^2\Delta_{\theta,\varphi}\psi$ от (10) в (3), с което получаваме уравнението

(11) $$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r\psi + \frac{1}{2mr^2}\underbrace{\hbar^2 l(l+1)\psi}_{-\hbar^2\Delta_{\theta,\varphi}\psi} + U\psi = E\psi, \text{ т.е.}$$

(12) $$\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r\psi + E\psi - U\psi - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\psi = 0, \text{ т.е.}$$

Умножаваме двете страни на (11) с $\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)$

(13) $$\Delta_r\psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - U(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right]\psi = 0.$$

Радиалното уравнение на Шрьодингер за вълнова функция $\psi(r) = R(r)$ се записва (*по пълно подобие на (13)*) във вида

(14) $$\Delta_r R(r) + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - U(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right]R(r) = 0.$$

Ако сравним **радиалното** уравнение на Шрьодингер (14) с **едномерното стационарно** уравнение на Шрьодингер (13), ще открием много голяма (но все-пак формална) прилика.

Ако радиалната част на оператора на Лаплас се „разпише" във вида

(15) $$\Delta_r = \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right) = \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\right)\frac{d}{dr} + \frac{1}{r^2}r^2\frac{d}{dr}\left(\frac{d}{dr}\right) = \frac{2r}{r^2}\frac{d}{dr} + \frac{d^2}{dr^2} \equiv \frac{2}{r}\frac{d}{dr} + \frac{d^2}{dr^2}, \text{ то}$$

(16) $$\frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - U(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right]R(r) = 0.$$

С полагането

(17) $$R(r) = \frac{u(r)}{r}$$

в горното уравнение се елиминира присъствието на първата производна, и то са представя във вида

$$(18)\qquad \frac{d^2u(r)}{dr^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-U(r)-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right]u(r)=0\,.$$

Твърде често в литературата именно това уравнение се нарича РУШ. Решаването на това уравнение почти изцяло зависи от вида на потенциала. В КМ интерес представляват потенциали от вида

$$(19)\qquad U(r)=C.\frac{1}{r^\beta}, \qquad \text{където} \qquad 0<\beta<2\,.$$

Нека изследваме РУШ (18) за потенциали от вида (19) в следните два екстремни случая:

а) $r\to\infty$,

б) $r\to 0$

I. Случай а) При $r\to\infty$ лесно се вижда, че както центробежния потенциал $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m}\frac{1}{r^2}$, така и силовия потенциал (19) клонят към нула, следователно уравнение (18) добива вида

$$(20)\qquad \frac{d^2u(r)}{dr^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}u(r)=0\,.$$

Нека разгледаме следните два частни подслучая:

а.1) $E>0$

В класическата механика това е случай на инфинитно движение. Ще покажем, че същата ситуация е налице и в квантовата механика. Действително, полагайки

$$(21)\qquad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2},$$

получаваме ОДУ на хармоничен осцилатор

$$(22)\qquad \frac{d^2u(r)}{dr^2}+k^2\,u(r)=0,$$

общото решение на което се дава с

$$(23)\qquad u(r)=A.\sin(kr+\varphi_0),\ \text{или}$$

$$(24)\qquad R(r)=\frac{u(r)}{r}=\frac{A}{r}.\sin(kr+\varphi_0),$$

където A и r са две интеграционни константи. Очевидно радиалната вълнова функция е затихваща, но осцилираща дори в безкрайността функция, което означава, че вероятността да намерим частицата в ∞ е $\neq 0$ (инфинитно движение).

а.2) $E<0$, т.е. $E=-|E|$.

Това би следвало да бъде случай на финитно (*пространствено-ограничено*) движение. Действително, в този случай можем да положим

$$(25)\qquad -\chi^2=\frac{2mE}{\hbar^2}=-\frac{2m}{\hbar^2}|E|\,.$$

Тогава (20) добива вида

$$(26)\qquad \frac{d^2u(r)}{dr^2}-\chi^2\,u(r)=0\,.$$

Характеристичното уравнение на това ЛХОДУ от втори ред има два корена: $\pm\chi$. Тогава общото решение се представя във вида

(27) $u(r) = C_1 e^{\chi r} + C_2 e^{-\chi r}$, или още

(28) $R(r) = \dfrac{u(r)}{r} = \dfrac{C_1}{r} e^{\chi r} + \dfrac{C_2}{r} e^{-\chi r}$.

Понеже при $r \to \infty$ членът $\dfrac{C_1}{r} e^{\chi r} \to \infty$, с което се нарушава изискването за ограниченост на вълновата функция в безкрайност, следва да приемем $C_1 \equiv 0$, с което решението (28) добива вида

(29) $R(r) = \dfrac{C}{r} e^{-\chi r}$.

При тези обстоятелства се оказва, че при $r \to \infty$ очевидно $R(r) \to 0$. Очевидно радиалната вълнова функция е бързо затихваща, което означава, че вероятността да намерим частицата в ∞ е 0 (финитно движение).

Нека разгледаме и другия екстремален случай

II. Случай б) При $r \to 0$ членовете $U_{цб} = \dfrac{\hbar^2 l(l+1)}{2m} \dfrac{1}{r^2}$ и $U(r) = \dfrac{C}{r^\beta}$ растат неограничено, но все пак доминира първият от тях, понеже $U_{цб} \approx \dfrac{1}{r^2}$, докато $U \approx \dfrac{1}{r^{2-\varepsilon}}$, където $0 < \varepsilon < 2$. При тези обстоятелства РУШ (18) добива следния асимптотичен вид

(30) $\dfrac{d^2 u(r)}{dr^2} + \dfrac{2m}{\hbar^2}\left[-\dfrac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right] u(r) = 0$, т.е.

(31) $\dfrac{d^2 u(r)}{dr^2} - \dfrac{l(l+1)}{r^2} u(r) = 0$.

Това ОДУ има особена точка в $r = 0$, но за всяко $r \neq 0$ то се свежда до

(32) $r^2 \dfrac{d^2 u(r)}{dr^2} - l(l+1)\, u(r) = 0$,

което е ЛХОДУ от втори ред с непостоянни коефициенти. Но то е от един „специален" тип, наречен уравнение на Ойлер, което чрез полагане $r = e^{-\xi}$ се свежда до ЛХОДУ с постоянни коефициенти, което се решава елементарно. Действително, нека направим смяна на променливата, като вземем под внимание, че $dr = -e^{-\xi} d\xi$

☞ $\dfrac{d}{dr} = \dfrac{d}{-e^{-\xi} d\xi} = -e^{\xi} \dfrac{d}{d\xi}$.

☞ $\dfrac{d^2}{dr^2} = \dfrac{d}{dr}\left(\dfrac{d}{dr}\right) = -e^{\xi} \dfrac{d}{d\xi}\left(-e^{\xi} \dfrac{d}{d\xi}\right) = e^{\xi} \dfrac{d}{d\xi}\left(e^{\xi} \dfrac{d}{d\xi}\right) = e^{\xi}\left(e^{\xi} \dfrac{d}{d\xi}\right) + e^{\xi} e^{\xi} \dfrac{d^2}{d\xi^2}$, т.е.

$$\frac{d^2}{dr^2} = e^{2\xi}\left(\frac{d}{d\xi} + \frac{d^2}{d\xi^2}\right).$$

Заместваме в (32)

$$\underbrace{e^{-2\xi}}_{r^2} e^{2\xi}\left(\frac{du(\xi)}{d\xi} + \frac{d^2 u(\xi)}{d\xi^2}\right) - l(l+1)\, u(\xi) = 0,$$

(33) $\dfrac{d^2u(\xi)}{d\xi^2}+\dfrac{du(\xi)}{d\xi}-l(l+1)\,u(\xi)=0$.

Това вече е ЛХОДУ с постоянни коефициенти. Неговото характеристично уравнение $\alpha^2+\alpha-l(l+1)\,u(r)=0$ има два корена: $\alpha_1=l$ и $\alpha_2=-(l+1)$. Тогава общото решение на (33) може да се представи във вида

(34) $u(\xi)=C_1e^{\ell\xi}+C_2e^{-(\ell+1)\xi}$.

Но по полагане $r=e^{-\xi}$, т.е. $\xi=-\ln r$, следователно

(35) $u(r)=C_1e^{-\ell\ln r}+C_2e^{+(\ell+1)\ln r}=C_1e^{\ln r^{-\ell}}+C_2e^{\ln r^{\ell+1}}\equiv C_1r^{-\ell}+C_2r^{\ell+1}$.

И така

(36) $R(r)=\dfrac{u(r)}{r}=\dfrac{C_1}{r^{\ell+1}}+C_2r^{\ell}$.

Но радиалната вълнова функция $R(r)$ трябва да бъде ограничена (неразходяща) при $r\to 0$, следователно трябва $C_1=0$, с което решението на РУШ за този частен случай добива вида

(37) $R(r)=C.r^{\ell}$

Март 2010 г. Гл. ас. Петко Митев