5. ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

5.1. ОПЕРАТОРЫ ФИЗИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН СООТНОШЕНИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ

Состояние частицы в квантовой механике описывается комплекснозначной функцией координат и времени $\Psi\ x,y,z,t\ = \Psi\ \vec{r},t$, называемой волновой функцией или пси-функцией частицы, причем функции Ψ и $c\Psi$, где c — произвольное комплексное число, описывают одно и то же состояние.

Если частица может находиться в состояниях, описываемых функциями $\Psi_1, \Psi_2, ..., \Psi_n$ (n – любое), то существует состояние, описываемое функцией

$$\Psi = \sum_{i=1}^{n} c_i \Psi_i \ ,$$

где c_i – произвольные комплексные числа. Это утверждение носит название принципа суперпозиции состояний. Таким образом, множество пси-функций образует комплексное линейное пространство, называемое пространством состояний частицы.

Скалярным произведением $\left(\Psi_1, \Psi_2\right)$ пси-функций называют величину

$$\left(\Psi_1, \Psi_2\right) = \int_{R^3} \Psi_1^*\left(\vec{r},t\right)\Psi_2\left(\vec{r},t\right) dV \ ,$$

где символ «*» означает комплексное сопряжение, $dV = dxdydz$, а интегрирование производится по всему трехмерному координатному пространству R^3. Если $\left(\Psi, \Psi\right) = 1$, то пси-функция называется нормированной.

Физический смысл нормированной пси-функции устанавливается следующим утверждением: величина

$$dP = \Psi^*\left(\vec{r},t\right)\Psi\left(\vec{r},t\right) dV = \left|\Psi\left(\vec{r},t\right)\right|^2 dV \qquad (1)$$

есть вероятность нахождения частицы в момент времени t в окрестности точки с радиус-вектором $\vec{r}$ внутри элемента объема dV, содержащего эту точку.

Если вероятность (1) не зависит от времени, то состояние частицы называют стационарным. В этом случае её пси-функция представляется в виде

$$\Psi\left(\vec{r},t\right) = f\left(t\right)\psi\left(\vec{r}\right),$$

где $\left|f(t)\right|^2 = 1$, и поэтому

$$\left|\Psi\left(\vec{r},t\right)\right|^2 = \left|\psi\left(\vec{r}\right)\right|^2 .$$

Поскольку поведение микрочастиц можно изучать лишь по их воздействию на макроскопические приборы, действие которых описывается на языке классической физики, то этот язык используется и для описания частиц в квантовой механике. Основными величинами, описывающими состояние частицы в классической механике, являются её радиус-вектор $\vec{r}$ и импульс $\vec{p}$. Все другие переменные, используемые для описания движения частицы, являются их функциями: $A = f(\vec{r}, \vec{p})$ (возможно еще и времени t явно, т.е. $A = f(\vec{r}, \vec{p}, t)$). Эти функциональные связи сохраняют и в квантовой механике, заменяя в них величины $\vec{r}$ и $\vec{p}$ линейными самосопряжёнными операторами, действующими в пространстве состояний частицы (в пространстве пси-функций).

Оператор $\hat{A}$ называется линейным, если для любых функций Ψ_1 и Ψ_2 выполняется равенство

$$\hat{A}\left(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2\right) = c_1\hat{A}\Psi_1 + c_2\hat{A}\Psi_2,$$

где c_1 и c_2 — произвольные комплексные числа.

Оператор $\hat{A}^+$ называется сопряженным оператору $\hat{A}$, если для любых Ψ_1 и Ψ_2 выполняется равенство

$$\left(\hat{A}^+\Psi_1, \Psi_2\right) = \left(\Psi_1, \hat{A}\Psi_2\right).$$

Оператор называется самосопряженным, если $\hat{A}^+ = \hat{A}$, т.е. для любых Ψ_1 и Ψ_2 справедливо равенство

$$\left(\hat{A}\Psi_1, \Psi_2\right) = \left(\Psi_1, \hat{A}\Psi_2\right).$$

Линейные самосопряженные операторы называются также эрмитовыми**.**

Основные алгебраические операции на множестве операторов определяются так:

$$\left(\hat{A} \pm \hat{B}\right)\Psi = \hat{A}\Psi \pm \hat{B}\Psi,$$

$$\hat{A}\hat{B}\Psi = \hat{A}\left(\hat{B}\Psi\right).$$

При этом, вообще говоря, $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$. Коммутатором операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ называют оператор

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \qquad (2)$$

Коммутатор (2) обладает следующими свойствами:

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = -\left[\hat{B}, \hat{A}\right],$$

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

$$\left[\hat{A}, \alpha\hat{B} + \beta\hat{C}\right] = \alpha\left[\hat{A}, \hat{B}\right] + \beta\left[\hat{A}, \hat{C}\right],$$

где α и β - произвольные комплексные числа.

Операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$, для которых $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = 0$, называются коммутирующими или перестановочными.

Физическим величинам в квантовой механике ставятся в соответствие эрмитовы операторы, действующие в пространстве пси-функций. При этом основным уравнением квантовой механики является уравнение вида

$$\hat{A}\Psi = a\Psi,$$

где a — некоторое число, называемое собственным значением оператора $\hat{A}$; функция Ψ в этом случае называется собственной функцией оператора $\hat{A}$, принадлежащей собственному значению a.

Все собственные значения эрмитова оператора — действительные числа.

Множество собственных значений оператора называют спектром его собственных значений. Спектр собственных значений может быть дискретным (квантованным), когда возможны только отдельные значения $a_1, a_2, ..., a_n, ...$, либо полосатым, когда значения a лежат в интервалах $a_1 \le a \le a_2$, $a_3 \le a \le a_4$,…, $a_n \le a \le a_{n+1}$, либо непрерывным (сплошным), когда возможны все значения a, заполняющие числовую ось. Наконец, возможен также смешанный спектр, состоящий из счётного и несчётного подмножеств собственных значений.

Физический смысл спектра собственных значений эрмитова оператора**,** поставленного в соответствие физической величине**,** устанавливается следующим утверждением:

Спектр собственных значений эрмитова оператора, поставленного в соответствие физической величине, исчерпывает все возможные результаты её измерения.

Собственные функции при этом описывают состояния микрочастицы, в которых физическая величина имеет определённые значения, равные собственным значениям рассматриваемого оператора. В частности, это состояния, в которые переходит частица при измерении физической величины.

В произвольном состоянии, описываемом пси-функцией $\Psi(\vec{r},t)$, физическая величина A может иметь лишь некоторое среднее значение $\langle A\rangle$, которое вычисляется по формуле, следующей из принципа суперпозиции состояний и вероятностной интерпретации пси-функции:

$$\langle A\rangle = (\Psi, \hat{A}\Psi). \tag{3}$$

Физическим величинам $\vec{r}$ и $\vec{p}$ в квантовой механике ставятся в соответствие операторы $\hat{\vec{r}}$ и $\hat{\vec{p}}$, действие которых в пространстве пси-функций $\Psi = \Psi(\vec{r},t)$ определяются так:

$$\hat{\vec{r}}\Psi = \vec{r}\Psi,$$
$$\hat{\vec{p}}\Psi = -i\hbar\nabla\Psi,$$

где $\hbar = 1{,}054\cdot 10^{-34}$ Дж·с – постоянная Планка, ∇ – оператор набла, i – мнимая единица. Символически это записывается в виде

$$\hat{\vec{r}} = \vec{r}, \quad \hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla. \tag{4}$$

Время t в квантовой механике оператором не является. Также как и в классической механике, оно выступает в роли эволюционного параметра состояний микрочастицы.

Классической физической величине $A = f(\vec{r},\vec{p},t)$ в квантовой механике ставится в соответствие оператор

$$\hat{A} = f\left(\hat{\vec{r}},\hat{\vec{p}},t\right) \tag{5}$$

при условии эрмитовости (самосопряженности) оператора $\hat{A}$. Последнее условие достигается предварительной симметризацией классического выражения (например, $\left(\vec{r},\vec{p}\right) = \frac{1}{2}\left(\left(\vec{r},\vec{p}\right)+\left(\vec{p},\vec{r}\right)\right)$).

Момент импульса классической частицы $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p}$, где знак «$\times$» означает векторное произведение. В соответствии с (4) и правилом (5) оператор момента импульса запишется так

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{r}\times\nabla, \tag{6}$$

или в проекциях на координатные оси

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

Модуль момента импульса частицы в квантовой механике определяется в задаче на собственные функции и собственные значения оператора квадрата момента импульса

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

Другой важнейшей функцией $\vec{r}$ и $\vec{p}$ является полная механическая энергия частицы в силовом поле $\vec{F}(\vec{r}) = -\nabla U(\vec{r})$

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} + U(\vec{r}),$$

где m — масса частицы, $U(\vec{r})$ — ее потенциальная энергия. Соответствующий оператор энергии, называемый оператором Гамильтона, согласно правилу (5) и формулам (4), имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + U(\hat{\vec{r}}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r}), \tag{7}$$

где ∇^2 – оператор Лапласа. Возможные значения энергии микрочастицы определяются в задаче на собственные функции и собственные значения оператора Гамильтона (7).

Неопределенностью ΔA физической величины A называют в квантовой механике среднее квадратичное отклонение величины A от ее среднего значения:

$$\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}\ .$$

Если операторы физических величин A и B удовлетворяют перестановочному соотношению $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = i\hat{C}$, где $\hat{C}$ — некоторый самосопряженный оператор, то их неопределенности связаны соотношением

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2}\langle C \rangle\ . \tag{8}$$

Неравенство (8) называется соотношением неопределенностей для физических величин A и B.

СООТНОШЕНИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ

Задача 5.1. Найти коммутаторы (перестановочные соотношения) операторов $\hat{x}$, $\hat{y}$, $\hat{z}$, $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$, $\hat{p}_z$, а также соотношения их неопределенностей.

Решение. Подействуем на произвольную функцию $\psi(\vec{r})$ оператором $\hat{x}, \hat{p}_x$. Используя определение коммутатора, а также правило умножения операторов, для операторов координаты $\hat{x}$ и соответствующей проекции импульса $\hat{p}_x$ получаем

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

Следовательно, $\left(\left[\hat{x}, \hat{p}_x\right] - i\hbar\right)\psi = 0$. Поскольку же функция y произвольна, то $\left[\hat{x}, \hat{p}_x\right] - i\hbar = 0$, или

$$\left[\hat{x}, \hat{p}_x\right] = i\hbar\ .$$

Для разноименных проекций находим

$$\left[\hat{x}, \hat{p}_y\right]\psi = -i\hbar\left(\hat{x}\frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y}\hat{x}\right)\psi = -i\hbar\left(\hat{x}\frac{\partial\psi}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y}(x\psi)\right) = -i\hbar\left(x\frac{\partial\psi}{\partial y} - x\frac{\partial\psi}{\partial y}\right) = 0$$

Отсюда, вследствие произвольности функции ψ, заключаем, что $\left[\hat{x}, \hat{p}_y\right] = 0$.

Тогда из равноправия координат следует, что

$$\left[\hat{x},\hat{p}_x\right]=\left[\hat{y},\hat{p}_y\right]=\left[\hat{z},\hat{p}_z\right]=i\hbar,$$

$$\left[\hat{x},\hat{p}_y\right]= \hat{y},\hat{p}_x = \hat{z},\hat{p}_x = \hat{x},\hat{p}_z = \hat{y},\hat{p}_z = \left[\hat{z},\hat{p}_y\right]=0$$

Воспользуемся теперь соотношением неопределенностей $\Delta A\Delta B\geq\frac{1}{2}\langle C\rangle$, положив, например, $\hat{A}=\hat{x}$, $\hat{B}=\hat{p}_x$, $\hat{C}=\hbar$. Тогда в соответствии с полученными результатами находим

$$\Delta x\Delta p_x\geq\frac{\hbar}{2};\quad \Delta y\Delta p_y\geq\frac{\hbar}{2};\quad \Delta z\Delta p_z\geq\frac{\hbar}{2}.$$

Для произведений всех разноименных неопределенностей справа получаем нуль.

Таким образом, одноименные проекции радиус-вектора микрочастицы и ее импульса не могут быть одновременно точно измерены.

Рассуждая аналогичным образом, легко получить

$$\hat{x},\hat{x} = \hat{y},\hat{y} = \hat{z},\hat{z} = \hat{x},\hat{z} = \hat{x},\hat{y} = \hat{y},\hat{z} = 0,$$

$$\hat{p}_x,\hat{p}_x = \left[\hat{p}_y,\hat{p}_y\right]= \hat{p}_z,\hat{p}_z = \left[\hat{p}_x,\hat{p}_y\right]= \hat{p}_x,\hat{p}_z = \left[\hat{p}_y,\hat{p}_z\right]=0,$$

что для произведений соответствующих неопределенностей дает ≥ 0.

Задача 5.2. Вычислить коммутаторы операторов проекций момента импульса на координатные оси *X, Y, Z.*

Решение. Запишем оператор момента импульса

$$\hat{\vec{L}}=\hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{p}}.$$

Его проекции на координатные оси имеют вид

$$\hat{L}_x=\hat{y}\hat{p}_z-\hat{z}\hat{p}_y,$$

$$\hat{L}_y=\hat{z}\hat{p}_x-\hat{x}\hat{p}_z,$$

$$\hat{L}_z=\hat{x}\hat{p}_y-\hat{y}\hat{p}_x.$$

Тогда, используя свойства коммутатора, получаем

$$\left[\hat{L}_x,\hat{L}_y\right]=\left[\hat{y}\hat{p}_z-\hat{z}p_y,\hat{L}_y\right]=\left[\hat{y}\hat{p}_z,\hat{L}_y\right]-\left[\hat{z}\hat{p}_y,\hat{L}_y\right]=\hat{y}\left[\hat{p}_z,\hat{L}_y\right]+\left[\hat{y},\hat{L}_y\right]\hat{p}_z-\hat{z}\left[\hat{p}_y,\hat{L}_y\right]-\left[\hat{z},\hat{L}_y\right]\hat{p}_y.$$

Поскольку оператор $\hat{L}_y$ не содержит $\hat{y}$ и $\hat{p}_y$, то, в соответствии с результатами предыдущей задачи,

$$\left[\hat{y},\hat{L}_y\right]=\left[\hat{p}_y,\hat{L}_y\right]=0.$$

Следовательно,

$$\left[\hat{L}_x,\hat{L}_y\right]=\hat{y}\left[\hat{p}_z,\hat{L}_y\right]-\left[\hat{z},\hat{L}_y\right]\hat{p}_y. \quad (1)$$

Но

$$\left[\hat{p}_z,\hat{L}_y\right]=-\left[\hat{L}_y,\hat{p}_z\right]=-\left[\hat{z}\hat{p}_x-\hat{x}\hat{p}_z,\hat{p}_z\right]=-\left[\hat{z}\hat{p}_x,\hat{p}_z\right]=-\hat{z}\left[\hat{p}_x,\hat{p}_z\right]-\left[\hat{z},\hat{p}_z\right]\hat{p}_x=-i\hbar\hat{p}_x \quad (2)$$

(здесь мы снова воспользовались результатам решения задачи 5.1), а

$$\left[\hat{z},\hat{L}_y\right]=-\left[\hat{L}_y,\hat{z}\right]=-\left[\hat{z}\hat{p}_x-\hat{x}\hat{p}_z,\hat{z}\right]=\left[\hat{x}\hat{p}_z,z\right]=\hat{x}\left[\hat{p}_z,\hat{z}\right]+\left[\hat{x},\hat{z}\right]\hat{p}_z=-i\hbar\hat{x}. \quad (3)$$

Подставляя (2) и (3) в (1), находим

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

Действуя аналогичным образом, получим

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

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

Задача 5.3. Найти минимальную энергию линейного осциллятора с частотой w, используя соотношение неопределенностей.

Решение. Оператор энергии линейного осциллятора имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2},$$

где m— масса частицы.

Следовательно, для квантово-механических средних получаем уравнение

$$\left\langle E \right\rangle = \frac{1}{2m}\left\langle p_x^2 \right\rangle + \frac{m\omega^2}{2}\left\langle x^2 \right\rangle. \quad (1)$$

Согласно определению среднеквадратичных отклонений,

$$\Delta p_x{}^2 = \left\langle p_x^2 \right\rangle - \left\langle p_x \right\rangle^2,$$

$$\Delta x{}^2 = \left\langle x^2 \right\rangle - \left\langle x \right\rangle^2.$$

Поэтому можно заключить, что

$$\Delta p_x{}^2 \le \left\langle p_x^2 \right\rangle, \quad (2)$$

$$\Delta x{}^2 \le \left\langle x^2 \right\rangle. \quad (3)$$

Тогда из уравнения (1) и условий (2), (3) следует, что

$$\left\langle E \right\rangle \ge \frac{1}{2m}\ \Delta p_x{}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\ \Delta x{}^2. \quad (4)$$

Но, согласно результатам задачи 5.1, $\Delta x \Delta p_x \ge \frac{\hbar}{2}$, т.е.

$$\Delta p_x \ge \frac{\hbar}{2\Delta x}. \quad (5)$$

Используя условие (5), можно еще более усилить неравенство (4):

$$\left\langle E \right\rangle \ge \frac{\hbar^2}{8m\left(\Delta x\right)^2} + \frac{m\omega^2\left(\Delta x\right)^2}{2}. \quad (6)$$

Введем для краткости следующие обозначения: $a = \frac{\hbar^2}{8m}$, $b = \frac{m\omega^2}{2}$, $z = \Delta x$, а также функцию

$$y(z) = \frac{a}{z^2} + bz^2.$$

Тогда неравенство (6) можно переписать в виде

$$\left\langle E \right\rangle \ge y(z). \quad (7)$$

Исследуем теперь функцию *y(z)* на экстремум: $y'(z) = -\frac{2a}{z^3} + 2bz$; $y''(z) = \frac{6a}{z^4} + 2b$. Так как a и b положительны, то при всех z $y''(z) \ge 0$, т.е. функция имеет минимум. Из уравнения $y'(z_m) = 0$ находим точку минимума

$$z_m = \left(\frac{a}{b}\right)^{\frac{1}{4}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,.$$

Так как неравенство (7) справедливо для всех z, то

$$\langle E\rangle \ge y\ \ z_m\ \ .$$

Но

$$y\left(z_m\right) = \frac{a}{z_m^2} + bz_m^2 = \frac{\hbar^2}{8m}\cdot\frac{2m\omega}{\hbar} + \frac{m\omega^2}{2}\cdot\frac{\hbar}{2m\omega} = \frac{\hbar\omega}{2}\,.$$

Следовательно,

$$\langle E\rangle \ge \frac{\hbar\omega}{2}. \qquad (8)$$

Поскольку неравенство (8) справедливо для любого состояния, а в собственном состоянии оператора $\hat{H}$, описываемом нормированной пси-функцией Υ, $\langle E\rangle = \ \Psi, \hat{H}\Psi\ \ = E$, то из (8) следует, что энергия линейного осциллятора не может быть меньше величины $\dfrac{\hbar\omega}{2}$, т.е.

$$E_{\min} = \frac{\hbar\omega}{2}.$$

Задача 5.4. Пси-функция частицы в стационарном состоянии имеет вид $\Psi = cf\ \ t\ \ e^{-\alpha r^2}$, где $\left|f(t)\right|^2 = 1$, $r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$, a — положительная константа. Вычислить соотношения неопределенностей координат и проекций импульса в этом состоянии.

Решение. Прежде всего, нормируем функцию Υ, т.е. найдем такой множитель c, при котором $(\Upsilon,\Upsilon) = 1$. По определению,

$$\Psi,\Psi\ \ = \int_{R^3}\Psi^*\Psi dV = |c|^2\int_{R^3} e^{-2\alpha r^2}dxdydz = |c|^2\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2}dx\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha y^2}dy\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha z^2}dz = |c|^2\left(\frac{\pi}{2\alpha}\right)^{\frac{3}{2}}. \qquad (1)$$

Здесь учтено, что каждый из интегралов – это интеграл Пуассона

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta t^2}dt = \sqrt{\frac{\pi}{\beta}}\,.$$

Приравнивая скалярное произведение (1) единице, находим

$$|c|^2 = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}}.$$

Вычислим теперь неопределенность $\Delta x = \sqrt{\left\langle x^2\right\rangle - \left\langle x\right\rangle^2}$. По определению,

$$\langle x\rangle = \ \Psi, \hat{x}\Psi\ \ = |c|^2\int_{R^3} xe^{-2\alpha r^2}dV = |c|^2\int_{-\infty}^{\infty} xe^{-2\alpha x^2}dx\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha y^2}dy\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha z^2}dz\,.$$

Но поскольку функция $xe^{-2\alpha x^2}$ нечетная, то интеграл от нее в симметричных пределах равен нулю. Следовательно,

$$\langle x\rangle = 0\,.$$

Далее

$$\left\langle x^2\right\rangle = |c|^2 \int\limits_{R^3} x^2 e^{-2ar^2} dV = |c|^2 \int\limits_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2\alpha x^2} dx \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha y^2} dy \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha z^2} dz = -\frac{1}{2}|c|^2 \frac{\pi}{2\alpha}\cdot\frac{d}{d\alpha}\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2} dx =$$

$$= -\frac{1}{2}\left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{\pi}{2\alpha}\cdot\frac{d}{d\alpha}\left(\frac{\pi}{2\alpha}\right)^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{4\alpha}.$$

Следовательно,

$$\Delta x = \frac{1}{2\sqrt{\alpha}}. \tag{2}$$

Найдем теперь $\Delta p_x = \sqrt{\left\langle p_x^2\right\rangle - \left\langle p_x\right\rangle^2}$.

$$\left\langle p_x\right\rangle = \left(\Psi, \hat{p}_x\Psi\right) = -i\hbar|c|^2 \int\limits_{R^3} e^{-\alpha r^2}\frac{\partial}{\partial x} e^{-\alpha r^2}\, dV = 2\alpha i\hbar|c|^2 \int\limits_{R^3} x e^{-\alpha r^2}\, dV = 2\alpha i\hbar\left\langle x\right\rangle = 0.$$

$$\left\langle p_x^2\right\rangle = -\hbar^2|c|^2 \int\limits_{R^3} e^{-\alpha r^2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{-2\alpha r^2} dV = -\hbar^2|c|^2 \int\limits_{R^3} e^{-\alpha r^2}\frac{\partial}{\partial x}\left(-2\alpha x e^{-2\alpha r^2}\right) dV =$$

$$= 2\alpha\hbar^2|c|^2\left(\int\limits_{R^3} e^{-2\alpha r^2}\, dV - 2\alpha\int\limits_{R^3} x^2 e^{-2\alpha r^2}\, dV\right) = 2\alpha\hbar^2\left(\left(\Psi,\Psi\right) - 2\alpha\left\langle x^2\right\rangle\right) = \alpha\hbar^2.$$

Таким образом,

$$\Delta p_x = \hbar\sqrt{\alpha}. \tag{3}$$

Тогда, в соответствии с (2) и (3),

$$\Delta x \Delta p_x = \frac{\hbar}{2}.$$

Поскольку же $|\Psi|^2 = |c|^2 e^{-2\alpha r^2}$ обладает сферической симметрией, то все проекции равноправны, и

$$\Delta y \Delta p_y = \frac{\hbar}{2},\ \Delta z \Delta p_z = \frac{\hbar}{2}.$$

Задача 5.5. Волновая функция частицы в стационарном состоянии имеет вид $\Psi = cf\ \ t\ \ e^{-\alpha r}$, где $|f(t)|^2 = 1$, $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, α — положительная константа. Найти среднее и наиболее вероятное расстояния частицы от начала координат.

Решение. Учитывая сферическую симметрию плотности вероятности $|\Psi|^2 = |c|^2 e^{-2\alpha r}$, для нормировки пси-функции в качестве dV можно взять объем шарового слоя радиусом r и толщиной dr:

$$dV = 4\pi r^2 dr. \tag{1}$$

Тогда

$$\Psi,\Psi\ \ = 4\pi|c|^2\int\limits_0^{\infty} e^{-2\alpha r} r^2 dr = \pi|c|^2 \frac{d^2}{d\alpha^2}\int\limits_0^{\infty} e^{-2\alpha r} dr = \frac{\pi}{2}|c|^2 \frac{d^2}{d\alpha^2}\left(\frac{1}{\alpha}\right) = \frac{\pi|c|^2}{\alpha^3}. \tag{2}$$

Приравнивая выражение (2) единице, находим

$$|c|^2 = \frac{\alpha^3}{\pi}. \tag{3}$$

Тогда с учетом (1) и (3)

$$\langle r\rangle = \left(\Psi,\hat{r}\Psi\right) = \int\limits_{R^3} r\left|\Psi\right|^2 dV = 4\alpha^3\int\limits_0^\infty e^{-2\alpha r}r^3dr = -\frac{\alpha^3}{4}\frac{d^3}{d\alpha^3}\left(\frac{1}{\alpha}\right) = \frac{3}{2\alpha}.$$

Итак, среднее расстояние частицы от начала координат

$$\langle r\rangle = \frac{3}{2\alpha}. \tag{4}$$

Умножая теперь $\left|\Psi\right|^2$ на объем шарового слоя (1) и учитывая (3), найдем вероятность того, что частица находится на расстоянии от начала координат, лежащем в интервале r до $r+dr$:

$$dW = 4\alpha^3e^{-2\alpha r}r^2dr.$$

Следовательно, плотность вероятности обнаружения частицы на расстоянии r имеет вид

$$\rho(r) = 4\alpha^3r^2e^{-2\alpha r}. \tag{5}$$

Чтобы найти наиболее вероятное расстояние, нужно определить точку максимума функции (5). Дифференцируя $\rho(r)$, получаем:

$$\rho'(r) = 8\alpha^3r(1-\alpha r)e^{-2\alpha r}, \tag{6}$$

$$\rho''(r) = -8\alpha^4re^{-2\alpha r} + (8\alpha^3re^{-2\alpha r})'(1-\alpha r). \tag{7}$$

Из формул (6) и (7) следует, что точка $r_m = \dfrac{1}{\alpha}$ является точкой максимума ($\rho''(r_m) < 0$) функции (5). Следовательно, наиболее вероятное расстояние частицы от начала координат равно $\dfrac{1}{\alpha}$. С учетом (4) можно записать

$$r_{\text{вер}} = \frac{1}{\alpha} = \frac{2}{3}\langle r\rangle.$$

Задача 5.6. Найти собственные функции и собственные значения оператора проекции момента импульса $\hat{L}_z$.

Решение. Уравнение на собственные функции и собственные значения оператора $\hat{L}_z$ имеет вид

$$\hat{L}_z\psi(\vec{r}) = l_z\psi(\vec{r}), \tag{1}$$

где

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

Найдем вид оператора $\hat{L}_z$ в сферических координатах (см. прил. 9)

$$x = r\sin\theta\cos\varphi, \tag{3}$$

$$y = r\sin\theta\sin\varphi, \tag{4}$$

$$z = r\cos\theta. \tag{5}$$

Согласно правилу дифференцирования сложной функции можно записать

$$\frac{\partial}{\partial\varphi} = \frac{\partial x}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial z}. \tag{6}$$

Но в соответствии с (3)—(5)

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

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

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

Подставляя эти выражения в (6), получаем

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} = -y\frac{\partial}{\partial x} + x\frac{\partial}{\partial y}\,. \tag{7}$$

Сравнивая (7) с (2), находим

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial \phi}\,. \tag{8}$$

С учетом (8) уравнение (1) принимает форму

$$-i\hbar\frac{\partial \psi(\vec{r})}{\partial \varphi} = l_z\psi(\vec{r})\ . \tag{9}$$

Решение уравнения (9) запишется в виде

$$\psi(\vec{r}) = f(r,\theta)e^{\frac{i}{\hbar}l_z\varphi}\ ,$$

где $f(r,\theta)$ — произвольная функция от r и θ. Поскольку $\left|\psi(\vec{r})\right|^2$ имеет вероятностный смысл, то функция $\psi(\vec{r})$ должна быть однозначной и, следовательно, не изменяться при переходе $j \to j + 2p$, т. е. должна быть периодична по j с периодом $2p$. Это возможно лишь в том случае, если $l_z = \hbar m$, где $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$.

Таким образом, спектр оператора $\hat{L}_z$ является квантованным, а собственные функции имеют вид

$$\psi_m(\vec{r}) = f(r,\theta)e^{im\varphi}\,.$$

Конкретизировать вид функции $f(r,\theta)$ можно, потребовав, чтобы $\psi_m(\vec{r})$ являлась также собственной функцией других операторов, коммутирующих с $\hat{L}_z$ (например, $\hat{\vec{L}}^2$ и $\hat{H}$), т.к. в этом случае соответствующие им физические величины могут быть одновременно точно измерены.

ЗАДАЧИ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОГО РЕШЕНИЯ

1. Найти собственные функции оператора импульса.

Ответ: $\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = ce^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p},\vec{r})}$.

2. Показать, что для любой скалярной функции $f(\vec{r})$ выполняется $\left[f\left(\hat{\vec{r}}\right), \hat{\vec{p}}\right] = i\hbar\nabla f\left(\vec{r}\right)$.

3. Показать, что оператор $\hat{\vec{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ коммутирует с любым из операторов проекций момента импульса $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$, т. е. $\left[\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_x\right] = \left[\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_y\right] = \left[\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_z\right] = 0$.

4. Найти условие, при котором произведение $\hat{A}\hat{B}$ двух эрмитовых операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ является тоже эрмитовым оператором.

Ответ: $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = 0$.

5. Показать, что квантово-механическим аналогом радиальной проекции импульса $p_r = \vec{p}\frac{\vec{r}}{r}$ является оператор $\hat{p}_r = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)$.

Указание: представить классическое выражение для p_r в симметризованном виде $p_r = \frac{1}{2}\left(\vec{p}\frac{\vec{r}}{r} + \frac{\vec{r}}{r}\vec{p}\right)$, а затем перейти к операторам $\hat{\vec{r}}$ и $\hat{\vec{p}}$.

6. Частица находится в стационарном состоянии с волновой функцией $\Psi = cf \;\; t \;\; e^{-\alpha r}$, где $\left|f(t)\right|^2 = 1$, $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, α — положительная константа. Вычислить произведение неопределенностей $\Delta x \Delta p_x$ в этом состоянии.

Ответ: $\Delta x \Delta p_x = \frac{\hbar}{\sqrt{3}}$.

7. Частица находится в стационарном состоянии с волновой функцией $\Psi = cf \;\; t \;\; e^{-\alpha r^2}$, где $\left|f(t)\right|^2 = 1$, $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, a — положительная константа. Найти среднее и наиболее вероятное расстояние частицы от начала координат.

Ответ: $r_{\text{вер}} = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}}$; $\langle r \rangle = \sqrt{\frac{2}{pa}}$.