Полезные формулы квантовой механики

Коцевич Андрей, группа Б02-920с

5 семестр, 2022

Может быть полезно при подготовке к *некоторому* экзамену по квантовой механике.

1 Некоторые формулы

1. Радиус Бора:
$$a_B = \frac{\hbar^2}{me^2} \tag{1}$$

2. Осцилляторные единицы:
$$q_{\text{osc}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad p_{\text{osc}} = \sqrt{m\omega\hbar} \tag{2}$$

3. Гамильтониан:
$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{V}(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}) \tag{3}$$
Лапласианы в различных системах координат (3D):
$$\Delta f = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} - \text{декартовая} \tag{4}$$
$$\Delta f = \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial f}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} - \text{цилиндрическая} \tag{5}$$
$$\Delta f = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial f}{\partial r}\right) - \frac{\hat{\mathbf{l}}^2}{r^2} - \text{сферическая} \tag{6}$$
Оператор квадрата орбитального момента:
$$\hat{\mathbf{l}}^2 = -\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial f}{\partial\theta}\right) - \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial^2 f}{\partial\varphi^2} \tag{7}$$
Для функции, зависящей только от r в n-мерном пространстве:
$$\Delta f = \frac{d^2 f}{dr^2} + \frac{n-1}{r}\frac{df}{dr} \tag{8}$$

4. Нестационарное уравнение Шрёдингера:
$$ih\frac{\partial\left|\psi\right\rangle}{\partial t} = \hat{H}\left|\psi\right\rangle \tag{9}$$

5. Стационарное уравнение Шрёдингера:
$$\hat{H}\left|\psi\right\rangle = E\left|\psi\right\rangle \tag{10}$$
В центральном потенциале $V(r)$, т.е. зависящем только от расстояния между частицами, полный набор наблюдаемых составляют энергия E, орбитальный момент l И его проекция на ось z m. Волновая функция разделяется на радиальную и угловую:
$$\langle\mathbf{r}|E,l,m\rangle = R_l^E(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{11}$$

Действие $\hat{\mathbf{l}}^2$ на сферическую гармонику:

$$\hat{\mathbf{l}}^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) = l(l+1)Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{12}$$

Уравнение Шрёдингера для радиальной волновой функции:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) R_l^E(r) + V(r)R_l^E(r) = ER_l^E(r) \tag{13}$$

Подстановка $R_l^E(r) = \frac{u(r)}{r}$ приводит уравнение к виду:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u''(r) + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r)\right)u(r) = Eu(r) \tag{14}$$

6. В задаче с потенциалом $V(x) = -V_0\delta(x-a)$ в точке a присутствует скачок производной:

$$\psi'(a+0) - \psi'(a-0) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(a) \tag{15}$$

Часто $V_0 = \frac{\hbar^2\kappa}{m}$, тогда $\psi'(a+0) - \psi'(a-0) = -2\kappa\psi(a)$.

7. Логарифмическая сшивка в точке $x = a$:

$$\left.\frac{\psi_1'(x)}{\psi_1(x)}\right|_{x=a} = \left.\frac{\psi_2'(x)}{\psi_2(x)}\right|_{x=a} \tag{16}$$

8. Теорема вириала:

$$2\langle\hat{T}\rangle = \left\langle \mathbf{r}\frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}}\right\rangle \tag{17}$$

Применив для кулоновского потенциала $V(r) = \frac{e}{r}$, получим

$$\langle r^{-1}\rangle = \frac{1}{an^2} \tag{18}$$

9. Рекуррентные соотношения Крамерса:

$$\frac{s+1}{n^2}\langle r^s\rangle - a(2s+1)\langle r^{s-1}\rangle + \frac{sa^2}{4}((2l+1)^2 - s^2)\langle r^{s-2}\rangle = 0, \quad s > -2l-1 \tag{19}$$

$$\langle r^{-1}\rangle = \frac{1}{an^2}, \quad \langle r\rangle = \frac{a}{2}(3n^2 - l(l+1)), \quad \langle r^2\rangle = \frac{a^2n^2}{2}(5n^2 + 1 - 3l(l+1)) \tag{20}$$

10. Соотношение Фейнмана-Гельмана для оператора $\hat{f}\,|n\rangle = f_n\,|n\rangle$:

$$\frac{\partial f_n}{\partial \lambda} = \langle n|\frac{\partial \hat{f}}{\partial \lambda}|n\rangle \tag{21}$$

При $\hat{f} = \hat{H}$ и $\lambda = l$ оно переходит в

$$\frac{\partial E_n}{\partial l} = \langle n|\frac{\partial \hat{H}}{\partial l}|n\rangle \tag{22}$$

Отсюда получим

$$\langle r^{-2}\rangle = \frac{2}{a^2n^3(2l+1)} \tag{23}$$

11. Движение электрона в электромагнитном поле:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2 - \frac{e}{c}\mathbf{A}}{2m} - \mu_B \hat{\sigma} \cdot \mathbf{B} - e\varphi \tag{24}$$

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}, \quad \mathbf{B} = \mathrm{rot}\mathbf{A} \tag{25}$$

Матрицы Паули:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{26}$$

12. Стационарная теория возмущений:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \tag{27}$$

Решение невозмущённой задачи:

$$\hat{H}_0 \left|\psi_0\right\rangle = E_0 \left|\psi_0\right\rangle \tag{28}$$

Первая поправка к энергии:

$$\epsilon_1 = \langle \psi_0 | \hat{V} | \psi_0 \rangle \tag{29}$$

13. Нестационарная теория возмущений:

14. Осцилляторное приближение.
Разложение по формуле Тейлора:

$$U(x) = U(x_0) + U'(x_0)(x - x_0) + \frac{U''(x_0)(x - x_0)^2}{2} \tag{30}$$

Пусть x_0 – точка экстремума потенциала $U'(x_0) = 0$, тогда

$$U''(x_0) = m\omega^2 \to \omega = \sqrt{\frac{U''(x_0)}{m}} \tag{31}$$

Применимость осцилляторного приближения:

$$q_{\mathrm{osc}} \ll l \tag{32}$$

где l – характерный масштаб системы.

15. Правило квантования Бора-Зоммерфельда:

$$\oint p(x)dx = 2\pi\hbar\,(n + \gamma_M) \tag{33}$$

Индекс Маслова $\gamma_M = \frac{1}{2}$ для обычных потенциалов, $\gamma_M = \frac{3}{4}$ для стенки.

16. Количество состояний с энергией, меньше заданной E (3D):

$$N(E) = \int d^3r \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \theta(E - E_p), \quad E_p = \frac{p^2}{2m} \tag{34}$$

Для сферически-симметричного потенциала:

$$N(E) = \frac{2(2m)^{3/2}}{3\pi\hbar} \int drr^2 (E - U(r))^{3/2} \tag{35}$$

17. Формула Гамова:

$$D = \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int |p(x)|dx\right), \quad p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))} \tag{36}$$

Для потенциалов с разрывами равенство является приближённым.
Время вылета из запрещённого потенциала:

$$\tau = \#\frac{1}{\omega D} \tag{37}$$

где ω – частота потенциала в осцилляторном приближении.

18. Борновское приближение:

$$f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\tilde{V}_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \tag{38}$$

В сферически-симметричном случае ($|\mathbf{k} - \mathbf{k}'| = 2k\sin\frac{\theta}{2}$):

$$f(\theta) = -\frac{m}{\hbar^2 k\sin\frac{\theta}{2}}\int\limits_0^\infty drr\sin\left(2kr\sin\frac{\theta}{2}\right)V(r) \tag{39}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\mathbf{n}, \mathbf{n}')|^2 \tag{40}$$

2 Ответы к некоторым известным задачам

2.1 Гармонический осциллятор

2.1.1 Одномерный

- Гамильтониан:

$$\hat{H} = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{m\omega x^2}{2} \tag{41}$$

- Уровни энергии:

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n \in \mathbb{N}_0 \tag{42}$$

- Собственные волновые функции:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) \tag{43}$$

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2} \text{ – полиномы Эрмита} \tag{44}$$

2.1.2 Трёхмерный

- Гамильтониан:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \frac{m\omega\mathbf{r}^2}{2} \tag{45}$$

- Уровни энергии:

$$E_{n_x,n_y,n_z} = E_{n_x} + E_{n_y} + E_{n_z} = \hbar\omega\left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}\right) \tag{46}$$

- Собственные волновые функции:

$$\psi_n(\mathbf{r}) = \psi_n(x)\psi_n(y)\psi_n(z) \tag{47}$$

2.2 Кулоновский потенциал в 3D

- Гамильтониан:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \tag{48}$$

- Уровни энергии:

$$E_n = -\frac{me^4}{2n^2\hbar^2} = -\frac{e^2}{2n^2 a_B^2}, \quad n = n_r + l + 1 \in \mathbb{N} \tag{49}$$

- Собственные волновые функции:

$$\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{50}$$

$$R_{nl}(r) = \frac{2}{n^2 a_B^{\frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!^3}} \left(\frac{2r}{na_B}\right) \exp\left(-\frac{r}{na_B}\right) L_{n+l}^{2nl+1}\left(\frac{2r}{na_B}\right) \tag{51}$$

$$L_k^s(x) = \frac{d^s L_k(x)}{dx^s} = \frac{d^s}{dx^s}\left(e^s \frac{d^k}{dx^k}(x^k e^{-x})\right) - \text{присоединённые полиномы Лаггера} \tag{52}$$

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) \tag{53}$$

$$P_m^l(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m P_n(x)}{dx^m} = \frac{(1-x^2)^{\frac{m}{2}}}{2^l l!} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2-1)^l - \text{присоединённые полиномы Лагранжа}$$

$$R_{10}(r) = \frac{2e^{-\frac{r}{a_B}}}{a_B^{\frac{3}{2}}}, \quad Y_{00}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}, \quad \psi_{100}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{1}{\pi a_B^3}} e^{-\frac{r}{a_B}} \tag{54}$$

3 Решение некоторых ДУ II порядка

3.1 Функции Бесселя

$$\psi''(z) + \frac{\psi'(z)}{z} + \left(1 - \frac{m^2}{z^2}\right)\psi(z) = 0 \tag{55}$$

Общее решение:

$$\psi(z) = C_1 J_m(z) + C_2 Y_m(z) \tag{56}$$

Функция Бесселя J_m в нуле регулярна, а Неймана – сингулярна, поэтому часто $C_2 = 0$. Асимптотика функции Бесселя при $z \gg 1$:

$$J_m(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos\left(z - \frac{\pi m}{2} - \frac{\pi}{4}\right) \tag{57}$$

n-ый нуль функции Бесселя $J_m(z)$:

$$\mu_{mn} \approx \frac{3\pi}{4} + \frac{\pi m}{2} + \pi n \tag{58}$$

3.2 Гипергеометрическая функция ${}_2F_1(a,b;c;z)$

$$z(1-z)f''(z)+(c-(a+b+1)z)f'(z)-abf(z)=0,\quad f(0)=1 \tag{59}$$

Общее решение ($c\neq 1$):

$$f(z)=C_1{}_2F_1(a,b;c;z)+C_2z^{1-c}{}_2F_1(b-c+1,a-c+1;2-c;z) \tag{60}$$

Функция z^{1-c} может расходиться при $z=0$, поэтому часто $C_2=0$. ${}_2F_1$ не расходится при $z\to\infty$, если a или b – отрицательное целое число. При целых отрицательных c ${}_2F_1$ не определена.

3.3 Вырожденная гипергеометрическая функция ${}_1F_1(a,b;z)$

$$zf''(z)+(b-z)f'(z)-af(z)=0,\quad f(0)=1 \tag{61}$$

Общее решение ($b\neq 1$):

$$f(z)=C_1{}_1F_1(a;b;z)+C_2z^{1-b}{}_1F_1(a-b+1;2-b;z) \tag{62}$$

При $b\to 1$ второе решение можно построить как $\lim\limits_{b\to 1}\frac{z^{1-b}{}_1F_1(a-b+1;2-b;z)-{}_1F_1(a;b;z)}{b-1}$. ${}_1F_1(a,b;z)$ не расходится при целых отрицательных a, а при целых отрицательных b ${}_1F_1(a,b;z)$ не определена.

3.4 Линейный потенциал

Функция Эйри возникает при решении уравнения Шрёдингера под действием постоянной силы (потенциал $U(x)=Fx$):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)+Fx\psi(x)=E\psi(x) \tag{63}$$

Подстановка $z=\frac{x-E/F}{(\hbar^2/2mF)^{1/3}}$ приводит к уравнению Эйри:

$$\psi''(z)-z\psi(z)=0 \tag{64}$$

Общее решение:

$$\psi(z)=C_1\mathrm{Ai}(z)+C_2\mathrm{Bi}(z) \tag{65}$$

Функция Эйри II рода расходится на бесконечности, поэтому часто $C_2=0$. Асимптотика функции Эйри при $z\to-\infty$:

$$\mathrm{Ai}(z)\approx\frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}}\sin\left(\frac{2}{3}(-z)^{\frac{3}{2}}+\frac{\pi}{4}\right) \tag{66}$$

n-ый нуль функции Эйри:

$$z_n\approx-\left(\frac{3\pi}{2}\left(n-\frac{1}{4}\right)\right)^{\frac{2}{3}} \tag{67}$$