Задание по квантовой механике

Авторы заметок: Хоружий Кирилл
Примак Евгений
Гурьева Соня

От: *17 декабря 2021 г.*

То, что остаётся после всех этих абстракций, не следует ли... считать тем реальным и неизменным содержанием, которое навязывается существам всех видов с одинаковой необходимостью, потому что оно не зависит ни от индивида, ни от момента времени, ни от точки зрения?

В. И. Ленин

Также выражаем благодарность Мещерякову Павлу за консультации по отдельным задачам.

Содержание

1 Первое задание

Упражнения

У1

В общем и целом нужно найти $A^\dagger$ и A^{-1} для заданного A.

а) Оператор инверсии. И так, что же такое оператор инверсии, а это $I\psi(x) = \psi(-x)$. Обратный оператор должен по определению

$$I^{-1}I\psi(x) = \psi(x) \qquad \overset{x\mapsto -x}{\Longrightarrow} \qquad I^{-1}\psi(x) = \psi(-x) \qquad \Rightarrow \qquad I^{-1} = I.$$

По определению сопряженного оператора $(\langle\Phi|I\Psi\rangle)^\dagger = \langle\Psi|I^\dagger\Phi\rangle$[1]. Напомним $[I\Psi](x) = \Psi(-x)$, что означает уже для состояний $\langle x|I\Psi\rangle = \langle -x|\Psi\rangle$, с этим знанием

$$\langle\Phi|I\Psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \langle\Phi|x\rangle\langle x|I\Psi\rangle dx = \int_{\mathbb{R}} \langle\Phi|x\rangle\langle -x|\Psi\rangle dx = /x \mapsto -x/ = \int_{\mathbb{R}} \langle\Phi|-x\rangle\langle x|\Psi\rangle dx = \langle I\Phi|\Psi\rangle = \langle\Phi|I^\dagger\Psi\rangle \qquad \Rightarrow \qquad I^* = I.$$

То есть получили, что оператор инверсии унитарен $II^\dagger = \mathbb{E}$ (единичный оператор).

б) Оператор трансляции. Оператор трансляции работает $\hat{T}_a|x\rangle = |x+a\rangle$ или так $\langle x|T_a\Psi\rangle = \Psi(x+a)$.

Вполне тривиально, что обратный к оператору трансляции это просто T_{-a}. Сопряженный же пойдём искать по той же схеме

$$\langle\Phi|T_a\Psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \langle\Phi|x\rangle\langle x+a|\Psi\rangle dx = /x \mapsto x-a/ = \int_{\mathbb{R}} \langle\Phi|x-a\rangle\langle x|\Psi\rangle dx = \langle T_a^*\Phi|\Psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \langle T_a^*\Phi|x\rangle\langle x|\Psi\rangle dx.$$

Где предпоследние равенство взято просто по определению сопряженного оператора, а последнее неравенство просто по представлению средней величины, тогда видим, что получается следующее

$$\langle x|T_a^\dagger\Phi\rangle = \Phi(x-a) \qquad \Rightarrow \qquad T_a^\dagger = T_{-a} = T_a^{-1}.$$

Мы вновь получили, что $T_a^\dagger T_a = \mathbb{E}$ – унитарный оператор.

У2

Теперь будем искать собственные значения и собственные числа для операторов, изученных в предыдущей задаче.

Очень удобно совпала, что и оператор трансляции и оператор инверсии являются унитарными. А для унитарного оператора $\hat{A}$ и его собственного состояния $\hat{A}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$ легко показать, что

$$\langle A\lambda|A\lambda\rangle = \langle\lambda|A^\dagger A\lambda\rangle = \langle\lambda|\lambda\rangle,$$

но в то же время, учитывая предыдущую выкладку

$$\langle A\lambda|A\lambda\rangle = \lambda\lambda^*\langle\lambda|\lambda\rangle \qquad \Rightarrow \qquad \langle\lambda|\lambda\rangle = 1 = \lambda\lambda^*.$$

Тогда имеем $\lambda = e^{i\varphi}$, что приводит к самому виду оператора $\hat{A} = e^{i\hat{\varphi}}$.

*а) Оператор инверсии. И так, когда мы поняли, что $\hat{I} = e^{i\hat{\varphi}}$, то уже всё просто

$$I\psi(x) = \psi(-x) = \lambda\psi(x).$$

Угадаем собственные функции, которые удовлетворяют соотношению выше

$$\begin{cases} \psi(x) = \psi(-x) \\ \lambda = 1 \end{cases} \qquad\qquad \begin{cases} -\psi(x) = \psi(-x) \\ \lambda = -1 \end{cases}$$

*б) Оператор трансляции. И так, оператор трансляции у нас тоже в виде $\hat{T}_a = e^{i\hat{\varphi}}$, и оператор фазы записывают в виде $\hat{\varphi} = \frac{1}{\hbar}\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{k}}$, где $\hat{\boldsymbol{k}}$ – оператор квазиимпульса.

Собственные же волновые функции для $\hat{T}_a$ выразим в координатном представлении

$$\hat{T}_a|\Psi\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{k}}|\Psi\rangle \qquad \Rightarrow \qquad \langle\boldsymbol{r}|T_a|\Psi\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{k}}|\Psi\rangle.$$

Они удовлетворяют уравнению

$$\Psi(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}) = e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{k}}\Psi(r) \qquad \Rightarrow \qquad \Psi(r) = e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{k}}\Phi(r), \quad \Phi(r+a) = \Phi(r).$$

В конце мы представили эти функции в таком периодическом виде, они называются функциями Блоха, и позже мы ещё встретим их в действии.

Собственные значения значит выражаются в виде $\lambda = e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{k}}$.

[1] тут можно стать свидетелем замены строчной пси на заглавную

У3

Посмотрим на дейтсвие на волновую функцию оператора, вида $e^{i\hat{I}\varphi}$:

$$e^{i\hat{I}\varphi}\psi(x) = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}\left(i\hat{I}\varphi\right)^k\psi(x) = \sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{(2k+1)!}\varphi^{2k+1}i^{2k}\psi(-x) + \sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{(2k)!}\varphi^{2k}i^{2k}\psi(x) = i\sin(\varphi)\psi(-x) + \cos(\varphi)\psi(x).$$

Откуда, в операторном смысле, можем записать равенство

$$e^{i\hat{I}\varphi} = i\sin(\varphi)\hat{I} + \cos(\varphi)\mathbb{1}$$

У4

Покажем, что $\hat{A}\hat{A}^\dagger$ – эрмитов оператор:

$$\langle\psi|\hat{A}\hat{A}^\dagger|\Phi\rangle = \langle\hat{A}^\dagger\Psi|\hat{A}^\dagger|\Phi\rangle = \langle\Phi|\hat{A}|\hat{A}^\dagger\Psi\rangle^\dagger = \langle\Phi|\hat{A}\hat{A}^\dagger|\Psi\rangle^\dagger = \langle\Psi|(\hat{A}\hat{A}^\dagger)^\dagger|\Phi\rangle.$$

Теперь покажем, что оператор оказывается положительно определен. Предположем противное, в частности, что существует отризательное собственное значние:

$$\langle\Psi|\hat{A}\hat{A}^\dagger|\Psi\rangle = -\lambda, \qquad \Rightarrow \qquad \langle\hat{A}^\dagger\Psi|\hat{A}^\dagger\Psi\rangle = -\lambda,$$

что противоречит идеям скалярного произведения.

У5

Покажем равенство коммутаторов:

$$[A,\, BC] = [A, B]C + A[B, C].$$

Возможно, здесь была опечатка, так как

$$[A,\, BC] = ABC - BCA = ABC - BAC + BAC - BCA = [A,\, B]C + B[A,\, C].$$

У6

В этом упражнении казалось бы раскладываем экспоненты в ряд и радуемся жизни. При чем ну ладно даже до третьего члена, всё перемножаем, находим коммутаторы и радуемся жизни. Ведь никогда дальше второго члена всё равно раскладывать не будем[2]

$$e^{\xi A}Be^{-i\xi} = \left(1 + \xi A + \frac{\xi^2A^2}{2} + \frac{\xi^3A^3}{6} + \ldots\right)\cdot B\cdot\left(1 - \xi A + \frac{\xi^2A^2}{2} - \frac{\xi^3A^3}{6} + \ldots\right) =$$

$$= B + \underbrace{\xi AB - \xi BA}_{\xi[A,B]} + \underbrace{\frac{\xi^2}{2}A^2B + \frac{\xi^2}{2}BA^2 - \xi^2 ABA}_{\frac{\xi^2}{2}(A[A,B]-[A,B]A)=\frac{\xi^2}{2}[A,[A,B]]} + \ldots = B + \xi[A,B] + \frac{\xi^2}{2!}[A,[A,B]] + \ldots$$

Что и хотелось показать.

Теперь докажем это формальнее, если вдруг очень надо.

Во первых сразу сформулируем общую формулу, которую будем доказывать

$$e^ABe^{-A} = B + \sum_n \underbrace{[A,[A,\ldots[A,B]\ldots]]}_{n}.$$

Начнем с вычисления производных от $F(\lambda) = e^{\lambda A}Be^{-\lambda A}$

$$\frac{d^n}{d\lambda^n}F(\lambda)\bigg|_{\lambda=0} = \sum_{k=0}^{n} C_n^k A^k e^{\lambda A}Be^{-\lambda A}A^{n-k}(-1)^{n-k}\bigg|_{\lambda=0} = \sum_{k=0}^{n} C_n^k A^k BA^{n-k}(-1)^{n-k},$$

Получив удобное представление разложим требуемое соотношение в ряд Тейлора

$$e^ABe^{-A} = F(1) = \sum_n\frac{1}{n!}\sum_{k=0}^{n} C_n^k A^k BA^{n-k}(-1)^{n-k}.$$

Проверим, что мы всё ещё получаем что-то разумное сравнив с тем, что мы в лоб раскрывали выше, например

[2] При чем не только в рамках этого курса, но и весьма вероятно по жизни в принципе.

при $n = 0$

$$\sum_{k=0}^{0} A^k B A^{0-k}(-1)^{n-k} = B.$$

Действительно. Теперь осталось доказать, следующее утверждение с коммутатором

$$\sum_{k=0}^{n} C_n^k A^k B A^{n-k}(-1)^{n-k} = \underbrace{[A, [A, \ldots [A, B] \ldots]]}_{n}.$$

Сделаем это по индукции, так для $n = 1$

$$\sum_{k=0}^{1} C_1^k A^k B A^{1-k}(-1)^{1-k} = -BA + AB = [A, B].$$

Тогда пусть для $n = m \geqslant 1$ тоже выполнено, что

$$\sum_{k=0}^{m} C_m^k A^k B A^{m-k}(-1)^{m-k} = \underbrace{[A, [A, \ldots [A, B] \ldots]]}_{m},$$

тогда при следующем $n = m + 1$

$$\sum_{k=0}^{m+1} C_{m+1}^k A^k B A^{m+1-k}(-1)^{m+1-k} =^{3} \sum_{k=0}^{m} C_m^k A^k B A^{m+1-k}(-1)^{m+1-k} + \sum_{k=0}^{m+1} C_n^{k-1} A^k B A^{m-(k-1)}(-1)^{m-(k-1)} =$$

$$= -\left(\sum_{k=0}^{m} C_m^k A^k B A^{m-k}(-1)^{m+1-k}\right) A + A\left(\sum_{k=1}^{m+1} C_m^{k-1} A^k B A^{m-(k-1)}(-1)^{m-(k-1)}\right) =$$

$$[A, \underbrace{[A, [A, \ldots [A, B] \ldots]]}_{m}] = \underbrace{[A, [A, \ldots [A, B] \ldots]]}_{m+1}.$$

Что и требовалось теперь уже доказать.

У7

Давайте посчитаем коммутаторы, в координатном представлении: $\hat{x} = x$ и $\hat{p}_x = -i\hbar\partial_x$, тогда $\hat{p}_x^2 = -\hbar^2\partial_x^2$.

0) Начнём с нулевого примера, чтобы убедиться, что правильно смотрим на мир:

$$[\hat{x}, \hat{p}]\psi(x) = x(-i\hbar)\partial_x\psi - (-i\hbar)\partial_x(x\psi) = i\hbar\psi + i\hbar x\partial_x\psi - i\hbar x\partial_x\psi = i\hbar\psi,$$

$$\Rightarrow \quad [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar.$$

а) Аналогично, в смысле операторного равенства,

$$[\hat{x}, \hat{p}^2]\psi(x) = x(-i\hbar)^2\partial_x^2\psi - (-i\hbar)^2\partial_x^2(x\psi) = -\hbar^2 x\partial_x^2\psi + \hbar^2\partial_x(\psi + x\partial_x\psi) =$$

$$= -\hbar^2 x\partial_x^2\psi + \hbar^2\partial_x\psi + \hbar^2\partial_x\psi + \hbar^2 x\partial_x^2\psi = 2i\hbar\hat{p}\psi,$$

$$\Rightarrow [\hat{x}, \hat{p}^2] = 2i\hbar\hat{p}.$$

б) Теперь найдём коммутатор с некоторой функцией $U(x)$:

$$[U(\hat{x}), \hat{p}]\psi(x) = U(x)(-i\hbar\partial_x\psi) + i\hbar\partial_x(U\psi) = U(-i\hbar\partial_x\psi) + i\hbar(\psi\partial_x U + U\partial_x\psi) = i\hbar(\partial_x U)\psi,$$

$$\Rightarrow [U(\hat{x}), \hat{p}] = 2i\hbar\hat{p}.$$

в) Наконец,

$$[U(\hat{x}), \hat{p}^2]\psi(x) = U(-\hbar^2)\partial_x^2\psi + \hbar^2\partial_x^2 U\psi = U(-\hbar^2)\psi'' + \hbar^2(\psi U'' + 2U'\psi' + \psi'' U) =$$

$$= \hbar^2(\psi U'' + 2U'\psi') = (\hbar^2 U'' + \hbar 2iU'\hat{p})\psi,$$

$$\Rightarrow [U(\hat{x}), \hat{p}^2] = \hbar^2 U'' + 2i\hbar U'\hat{p}.$$

У8

Докажем соотношение Фейнмана-Гелмана:

$$\partial_\lambda f_n(\lambda) = \langle n|\partial_\lambda \hat{f}(\lambda)|n\rangle,$$

где f_n – собственное значение $\hat{f}\,|n\rangle = f_n\,|n\rangle$, то есть $f_n = \langle n|\hat{f}|n\rangle$.

[3] Тут использовали $C_{m+1}^k = C_m^k + C_m^{k-1}$, оговорив, что при $k = m+1$ положим $C_m^{m+1} = 0$ и при $k = 0$ положим $C_m^{-1} = 0$.

По формуле Лейбница:

$$\partial_\lambda f_n = \langle n|\partial_\lambda \hat{f}|n\rangle + \langle \partial_\lambda n|\hat{f}|n\rangle + \langle n|\hat{f}|\partial_\lambda n\rangle = \langle n|\partial_\lambda \hat{f}|n\rangle + \langle \partial_\lambda n|n\rangle f_n + \langle n|\partial_\lambda n\rangle f_n =$$
$$= \langle n|\partial_\lambda \hat{f}|n\rangle + f_n \partial_\lambda \langle n|n\rangle = \langle n|\partial_\lambda \hat{f}|n\rangle,$$

что и требовалось доказать.

У9

Вспомним, что оператор трансляции нам в принципе задавался как

$$\hat{T}_a = e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}}.$$

Мы в таком случае в этом упражнении имеем просто оператор трансляции слева и обратной трансляции справа

$$e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}} U(\boldsymbol{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}} \quad \overset{\cdot\Psi(\boldsymbol{r})}{\Longrightarrow} \quad \hat{T}_\alpha U(\boldsymbol{r}) \hat{T}_{-a} \Psi(\boldsymbol{r}) = \hat{T}_\alpha [U(\boldsymbol{r})\Psi(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{a})] = U(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a})\Psi(r).$$

Получили такую же домноженну на просто пси штуку, а значит есть соответсвие

$$\hat{T}_\alpha U(\boldsymbol{r}) \hat{T}_{-a} = U(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}).$$

У10

Для операторов рождения и уничтожения ($[\hat{a},\, \hat{a}^\dagger] \ominus 1$) найдём коммутатор вида

$$[\hat{a},\, f(\hat{a}^\dagger)] = \hat{a} f(\hat{a}^\dagger) - f(\hat{a}^\dagger)\hat{a}.$$

Глубоко. Допустим аналитичность f, и воспользуемся разложением по Тейлору $f(\hat{a}^\dagger) = \sum_{n=0}^\infty c_n (\hat{a}^\dagger)^n$:

$$[\hat{a},\, f(\hat{a}^\dagger)] = \sum_{n=0}^\infty c_n \left(\hat{a}(\hat{a}^\dagger)^n - (\hat{a}^\dagger)^n \hat{a}\right) = \sum_{n=0}^\infty c_n \left((1+\hat{a}^\dagger\hat{a})(\hat{a}^\dagger)^{n-1} - (\hat{a}^\dagger)^n\hat{a}\right) =$$
$$\ominus \sum_{n=0}^\infty c_n \left((\hat{a}^\dagger)^{n-1}\hat{a}^\dagger(1+\hat{a}^\dagger\hat{a})(\hat{a}^\dagger)^{n-2} - (\hat{a}^\dagger)^n\hat{a}\right) =$$
$$= \sum_{n=0}^\infty c_n \left(2(\hat{a}^\dagger)^{n-1} + (\hat{a}^\dagger)^2\hat{a}(\hat{a}^\dagger)^{n-2} - (\hat{a}^\dagger)^n\hat{a}\right) = \sum_{n=0}^\infty c_n n\cdot(\hat{a}^\dagger)^{n-1} = f'(\hat{a}^\dagger),$$

что достаточно забавно.

У11

Выразим оператор координаты и импульса через операторы рождения и уничтожения:

$$\begin{cases} \hat{q} = \frac{q_0}{\sqrt{2}}(\hat{a}^\dagger + \hat{a}), \\ \hat{p} = \frac{ip_0}{\sqrt{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \end{cases} \qquad q_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \qquad p_0 = \sqrt{m\omega\hbar}.$$

Для операторов $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$ верно, что

$$\hat{a}\,|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle\, m \qquad \hat{a}^\dagger\,|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle\,.$$

Для начала квадрат координаты:

$$\hat{q}^2 = \frac{q_0^2}{2}\left(\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger\right) = \frac{\hbar}{m\omega}\left(n+\frac{1}{2}\right) = \frac{E_n}{m\omega^2}.$$

Стоит заметить, что все «несбалансированные» $\hat{a}$ и $\hat{a}^\dagger$ не дадут вклада, так как $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$. Поэтому нечетные степени $\langle q^{2k+1}\rangle = \langle p^{2k+1}\rangle = 0$, так как все оператору будут «несбалансированы».

Четвертая степень координаты:

$$\langle q^4\rangle = \frac{q_0^4}{4}\left(\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger\right)^2 = \ldots = \frac{1}{4}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2 \left(6n^2+6n+3\right).$$

Аналогично, находим квадрат импульса

$$\langle \hat{p}^2\rangle = \frac{p_0^2}{2}(2n+2) = p_0^2\left(n+\frac{1}{2}\right) = mE_n$$

И его четвертую степень:

$$\langle \hat{p}^4\rangle = \frac{p_0^2}{4}(6n^2+6n+3) = \frac{(m\omega\hbar)^2}{4}(6n^2+6n+3),$$

что объясняется ненулевым вкладом только слагаемых с $(-a^\dagger)^{4/2}$.

Полиномы. Если вдруг будет интересно $F_k(n) = \langle n|(\hat{a} \pm \hat{a}^\dagger)^k|n\rangle$, то ниже приведены посчитанные значения для первых нескольких k:

$$\begin{aligned}
F_4(n) &= 6n^2 + 6n + 3;\\
F_6(n) &= 20n^3 + 30n^2 + 40n + 15;\\
F_8(n) &= 70n^4 + 140n^3 + 350n^2 + 280n + 105;
\end{aligned}$$

Можно, конечно, продолжить..

$$\begin{aligned}
F_{10}(n) &= 252n^5 + 630n^4 + 2520n^3 + 3150n^2 + 2898n + 945;\\
F_{12}(n) &= 924n^6 + 2772n^5 + 16170n^4 + 27720n^3 + 45276n^2 + 31878n + 10395;\\
F_{14}(n) &= 3432n^7 + 12012n^6 + 96096n^5 + 210210n^4 + 528528n^3 + 588588n^2 + 453024n + 135135,
\end{aligned}$$

в общем, да.

Соотношение неопределенностей. Обсудим величину

$$\sqrt{\langle x^2\rangle\langle p^2\rangle} = q_0 p_0 \left(n + \frac{1}{2}\right) = \hbar\left(n + \frac{1}{2}\right) \geqslant \frac{\hbar}{2},$$

что полностью соответсвует принципу неопределенности Гейзенберга.

У12

Найдём операторы рождения и уничтожения для гармонического осцилляора в представлении Гейзенберга. Запишем уравнение Гейзенберга

$$i\hbar\frac{d\hat{f}}{dt} = i\hbar\frac{\partial\hat{f}}{\partial t} + \left[\hat{f},\, \hat{H}\right].$$

Запищем гамильтониан системы

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right),$$

тогда можем найти

$$i\hbar\frac{d\hat{a}}{dt} = \hbar\omega\left[\hat{a},\, \hat{a}^\dagger\hat{a}\right] = \hbar\omega\left(\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}\right) = \hbar\omega\left(\left[\hat{a},\, \hat{a}^\dagger\right]\hat{a}\right) = \hbar\omega\hat{a},$$

и, решая диффур, находим

$$i\hbar\frac{d\hat{a}}{dt} = \hbar\omega\hat{a}, \qquad \Rightarrow \qquad \begin{cases} \hat{a}(t) = e^{-i\omega t}\hat{a},\\ \hat{a}^\dagger(t) = e^{i\omega t}\hat{a}^\dagger. \end{cases}$$

Или, можно было напрямую, воспользоваться

$$\hat{U}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right), \qquad \Rightarrow \qquad \hat{a}(t) = \hat{a} + (i\omega t)[\hat{a}^\dagger\hat{a},\, \hat{a}] + (i\omega t)^2[\hat{a}^\dagger\hat{a},\, -\hat{a}] + \ldots = \exp(-i\omega t)\hat{a},$$

где мы воспользовались равенством, доказанным в У6.

T1

Собственные функции. Рассмотрим частицу в очень глубокой потенциальной одномерной яме:
$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x \notin [0,a]; \\ 0. & x \in [0,a]; \end{cases} \qquad H(x,\, -i\hbar\partial_x)\psi(x) = E\psi(x), \qquad \Rightarrow \qquad \psi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0.$$
Тогда решение может быть найдено в виде
$$\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx), \qquad k^2 = \tfrac{2m}{\hbar^2}E,$$
но в силу требования $\psi(x)|_{x\in\{0,a\}} = 0$, сразу получаем $B = 0$, и условие на k:
$$k = k_n = \frac{\pi n}{a}, \qquad \Rightarrow \qquad E_n = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\pi^2 n^2,$$
то есть спектр дискретный.

Из нормировки ψ можем найти
$$\langle \psi|\psi\rangle = \int_0^a dx|\psi(x)|^2 = \frac{|A|^2}{2}a = 1, \qquad \Rightarrow \qquad A = \sqrt{\frac{2}{a}}.$$
Тогда искомая волнавая функция стационарных состояний и соответсвующие уровни энергии
$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\tfrac{\pi n}{a}x\right), \qquad E_n = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\pi^2 n^2.$$

Средние значения. Найдём среднее значение для координаты
$$\langle x\rangle = \int_0^a x|\psi_n(x)|^2\,dx = \frac{2}{a}\int_0^a x\sin^(k_n x)\,dx = \frac{2}{a}\left(\frac{a^2}{4} - \frac{1}{4k_n}\frac{1}{2k_n}\cos(2k_n x)\Big|_0^a\right) = \frac{a}{2}.$$
Аналогично можем найти среднее значение импульса
$$\langle p\rangle = \int_0^a dx\psi^*\hat{p}\psi = -i\hbar k_n\frac{2}{a}\int_0^a \sin(k_n x)\cos(k_n x)\,dx = -\frac{i\hbar k_n}{a}\int_0^a \sin(2k_n x) = 0,$$
в силу интегрирования по периоду.

Теперь можем посчитать дисперсию величин
$$(\Delta x)^2 = \langle\psi|(\hat{x}-\bar{x})^2|\psi\rangle = \langle\psi|x^2|\psi\rangle - \bar{x}^2,$$
и аналогично с $\hat{p}$. Для координаты среднее квадрата
$$\langle x^2\rangle = \frac{2}{a}x^2\sin^2(k_n x)\,dx = \frac{a^2}{3} + \frac{1}{ak_n}\int_0^a \sin(2k_n x)x\,dx = \frac{a^2}{3} - \frac{1}{2ak_n^2}x\cos(2k_n x)\Big|_0^a = \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2\pi^2 n^2},$$
а соответсвующая дисперсия
$$(\delta x)^2 = a^2\left(\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2 n^2}\right).$$
Теперь для импульса
$$(\Delta p)^2 = \langle p^2\rangle = \int_0^a dx\psi^*\left(-\hbar^2\partial_x^2\right)\psi = \frac{2k_n^2\hbar^2}{2a}\int_0^a dx\,(1 = \cos(2k_n x)) = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{a^2}.$$

Сравним с классикой. Понятно, что частица равновероятно может находиться в любой части ящика (в классическом случае), тогда
$$\int_0^a P(x)\,dx = 1, \quad \Rightarrow \quad P(x) = \frac{1}{a}, \qquad \Rightarrow \qquad \langle x\rangle^{\text{кл}} = \int_0^a P(x)x\,dx = \frac{a}{2} = \langle x\rangle.$$
Теперь для импульса, $p \in \{-p_0, p_0\}$, где $P(p_0) = P(-p_0) = 1/2$, тогда
$$\langle p\rangle^{\text{кл}} = P(p_0)p_0 + P(-p_0)(-p_0) = 0 = \langle p\rangle.$$
Аналогично с квадратом координаты
$$\langle x^2\rangle^{\text{кл}} = \int_0^a \frac{1}{a}x^2\,dx = \frac{a^2}{3} = \lim_{n\to\infty}\langle x^2\rangle,$$
что прекрасно сходится с принципом соответствия.

Т2

а) Неглубокая симметричная яма. Задан потенциал, с учетом которого мы получаем оператор Гамильтона для нашей задачи:

$$U(x) = \begin{cases} -U_0 \ , \ |x| \leqslant a \\ \quad 0 \ , \ |x| \geqslant a \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \hat{H} = \begin{cases} \frac{p^2}{2m} - U_0 \ , & |x| \leqslant a \\ \frac{p^2}{2m} \ , & |x| \geqslant a \end{cases}$$

Тогда решаем уравнение Шредингера $\hat{H}\psi = E\psi$ вне и снаружи ямы, помня что $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\psi + (\hat{U} - E) = 0 \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 + E)\psi = 0 \\ \quad \psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0 \end{cases}$$

Посмотрим теперь на движение частицы в неглубокой потенциальной яме

$$U(x) = \{-U_0, |x| < a; \quad 0, |x| \geqslant a. \qquad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U}(x).$$

Так как речь идёт про связанные состояния, то будем считать $E < 0$, тогда, для удобства, переобозначим $E \to -E$. Запишем стационарное уравнение Шредингера, сразу раскрывая $U(r)$, выделяем две области:

$$\begin{cases} \psi'' + k^2\psi = 0, & |x| < a; \\ \psi'' - \varkappa^2\psi = 0, & |x| > a; \end{cases} \qquad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E), \qquad \varkappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E,$$

В силу симметричности потенциала ($[\hat{I}, \hat{H}] = 0$), решения могут быть найдены, как собственные функции оператора инверсии, то есть в виде четных и нечетных функций. Тогда сразу можем выделить два решения:

$$\psi^+(x) = \begin{cases} A\cos(kx), & |x| < a; \\ Be^{-\varkappa|x|}, & |x| > a; \end{cases} \qquad \psi^-(x) = \begin{cases} A\sin(kx), & |x| < a; \\ B\,\mathrm{sign}(x)e^{-\varkappa|x|}, & |x| > a; \end{cases}$$

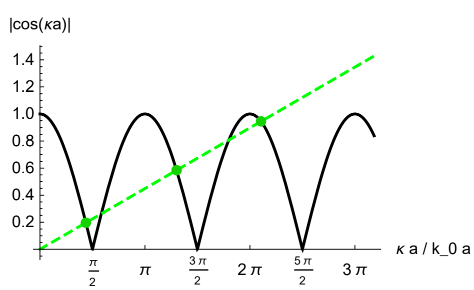
где сразу воспользовались L_2 интегрируемостью ψ и выбросили решение вида $e^{\varkappa x}$.

Осталось воспользоваться гладкостью $\psi(x)$, удобнее будет проверить непрерывность логарифмической производной

$$(\ln\psi)' = \frac{\psi'}{\psi}, \quad \Rightarrow \quad \frac{\psi'(a-\varepsilon)}{\psi(a-\varepsilon)} = \frac{\psi'(a+\varepsilon)}{\psi(a+\varepsilon)}, \quad \Rightarrow \quad \varkappa = k\tan(ka), \quad \Leftrightarrow \quad |\cos(ka)| = \frac{ka}{k_0 a},$$

где ввели $k_0^2 = \varkappa^2 + k^2$. Получили трансцендентное уравнение на уровни энергии, анализ которого удобнее всего произвести графически (рис. 1). Ясно, что спектр не просто дискретен, но и ограничен. Четное состояние существует при $k_0 a > 0$, N четных существует при $k_0 a \geqslant (N-1)\pi$. Важно, что решения существуют только при $\operatorname{tg} ka > 0$.

Аналогично, через логарифмическую производную нахожим условие на уровни энергии нечетных решений.



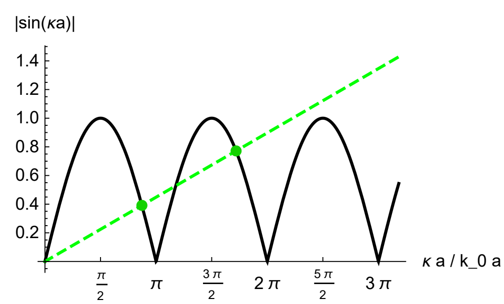


Рис. 1: Трансцендентное уравнение (для четного и нечетного решения) на уровни энергии к задаче Т2

Т3

а) Задан потенциал $U(x) = -\frac{\hbar^2}{m}\varkappa_0\delta(x)$, который представляет собой дельта-яму. Прежде чем как всегда решать стационарное уравнение шредингера сделаем замечание, что $E < 0$, тогда получим

$$\hat{H}\psi = -|E|\psi, \qquad \varkappa^2 := \frac{2m|E|}{\hbar}.$$

С такой заменой получим вполне красивый диффур второго порядка:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' - \frac{\hbar^2}{m}\varkappa_0\delta(x)\psi + |E|\psi = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \psi'' - (\varkappa - 2\varkappa_0\delta(x))\psi = 0.$$

Мы ожидаем непрерывности от волной функции на границах областей, а именно в точке дельта-ямы, то есть одним из граничных условий будет $\psi(-0) = \psi(+0)$.

Потребовав непрерывности ψ, из-за дельта функции, мы получаем разрыв для первой производной

$$\psi'' - (\varkappa - 2\varkappa_0\delta(x))\psi = 0 \qquad \xRightarrow{\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}} \qquad \psi'(+0) - \psi'(-0) = -2\varkappa_0\psi(0).$$

Вне ямы будем наблюдать спад по экспоненте, сама же яма – по сути точечна, значит такое же поведение будем ожидать и в связном состоянии, таким образом ищем волновую функцию как

$$\psi = \begin{cases} C_1 e^{-\varkappa x} &, x > 0 \\ C_2 e^{\varkappa x} &, x < 0 \end{cases}$$

Из непрерывности получим автоматически, что

$$\psi(-0) = \psi(+0) \qquad \Rightarrow \qquad C_2 = C_1 = C.$$

Разрыв же первой производной позволит нам найти

$$\psi'(+0) - \psi'(-0) = -2\varkappa_0\psi(0) \quad \Rightarrow \quad -2\varkappa_0 C = C(-\varkappa - \varkappa) \quad \Rightarrow \quad \varkappa = \varkappa_0.$$

Таким образом энергия связного состояния:

$$\boxed{E = -\frac{\hbar^2\varkappa_0^2}{2m}}$$

Теперь, осталось проверить нормировку нашей волновой функции

$$\int_{\mathbb{R}} \psi\psi^* dx = 1 \quad \Rightarrow \quad C^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\varkappa_0|x|}dx = \frac{C^2}{\varkappa_0}\int_0^{+\infty} e^{-2\varkappa_0 x} d2\varkappa_0 x = \frac{C^2}{\varkappa_0} = 1 \quad \Rightarrow \quad \varkappa_0 = C^2.$$

Таким образом собирая всё вместе получаем волновую функцию вида:

$$\boxed{\psi(x) = \sqrt{\varkappa_0}e^{-\varkappa_0|x|}}$$

Мы получили волновую функцию в координатном представлении для уровня энергии ноль $\psi(x) = \langle x|0\rangle$. Тогда в импульсном представлении

$$\psi(p) = \langle p|0\rangle = \int_{\mathbb{R}} dx \langle p|x\rangle\langle x|0\rangle = \Big/ \langle p|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\frac{i}{\hbar}px} \Big/ = \frac{\sqrt{\varkappa_0}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{\mathbb{R}} e^{-\varkappa_0 x - \frac{i}{\hbar}px}dx = \frac{\sqrt{\varkappa_0}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\cdot\frac{2\varkappa_0}{\varkappa_0^2 + (p/\hbar)^2} = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{(\varkappa_0\hbar)^{3/2}}{(\varkappa_0\hbar)^2 + p^2}.$$

Дальше будет менее широко, честно, а ведь это ещё опущено наше любимое интегрирование по частям.

$$\boxed{\langle 0|\hat{p}|0\rangle = 0}, \qquad \boxed{\langle 0|\hat{x}|0\rangle = 0}.$$

По тому же определению теперь будем получать нечто сложнее чем ноль

$$\langle 0|\hat{x}^2|0\rangle = \int_{\mathbb{R}} \varkappa e^{-2\varkappa_0|x|}\hat{x}^2 dx = \underbrace{2\varkappa_0}_{\alpha}\int_0^{+\infty} e^{-2\varkappa_0 x}x^2 dx = \alpha\frac{d^2}{d\alpha^2}\int_0^{+\infty} e^{-\alpha x}dx = \frac{2}{\alpha^2} = \boxed{\frac{1}{2\varkappa_0^2}}.$$

Красиво продифференцировали под знаком интеграла и получили ответ, осталось ещё немного, не зря же мы $\psi(p)$ считали, стоит, кстати, обратить внимание, что теперь именно по α^2 дифференцируем:

$$\langle 0|\hat{p}^2|0\rangle = \int_{\mathbb{R}} dp\ p^2\frac{2}{\pi}\frac{(\varkappa_0\hbar)^3}{((\hbar\varkappa_0)^2 + p^2)^2} = \frac{2}{\pi}(\varkappa_0\hbar)^3(-\frac{d}{d\alpha^2})\int_{\mathbb{R}}\frac{p^2}{\alpha^2 p^2}dp = \frac{2}{\pi}(\varkappa_0\hbar)^3(-\frac{d}{d\alpha^2})\frac{2\pi i(i\alpha)^2}{2i\alpha}\Big|_{\alpha=\varkappa_0\hbar} = \boxed{(\varkappa_0\hbar)^2}.$$

Из-за того, что средние от координаты и импульса нулевые – дисперсии совпадают с средними квадратами.

Для интереса теперь ещё посмотрим на соотношение неопределенности

$$\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle\langle(\Delta\hat{p})^2\rangle = \frac{1}{2\varkappa_0^2}\varkappa_0^2\hbar^2 = \frac{\hbar^2}{2},$$

что больше абсолютного минимума для когерентного состояния осциллятора $= h^2/4$.

б) И казалось бы всё хорошо, всё изучили в связном состоянии, но теперь в той же задаче мы будем смотреть на области непрерывного спектра и решать задачу о рассеянии волны на потенциале.

Запишем тогда наиболее общую волновую функцию, в которой на нижней строчки стоят (условно) волны распространяющиеся левее ямы, а точнее подошедшая из $-\infty$ с амплитудой C, и ушедшая в $-\infty$ с амплитудой D. Аналогично правее потенциала будет ушедшая в $+\infty$ с амплитудой A и пришедшая из $+\infty$ с амплитудой B.

$$\psi = \begin{cases} Ae^{i\varkappa x} + Be^{-i\varkappa x} &, x > 0 \\ Ce^{i\varkappa x} + De^{-i\varkappa x} &, x < 0 \end{cases} \qquad \Rightarrow \qquad \psi = \begin{cases} Ae^{i\varkappa x} &, x > 0 \\ Ce^{i\varkappa x} + De^{-i\varkappa x} &, x < 0 \end{cases}$$

Мы сразу выберем, что волна падала слева, значит $B=0$, и пусть она это делала с $C=1$, так как в вопросах рассеивания нас будут интересовать относительные величины.

Тем не менее у нас всё так же должно быть непрерывно для волновой функции и скачкообразно для её производной в нуле:

$$\begin{aligned} A+B&=C+D \\ i\varkappa(A-B)-i\varkappa(C-D)&=-2\varkappa_0\psi(0) \end{aligned} \qquad \Rightarrow \qquad i\varkappa[(C-D)-(A-B)]=2\varkappa_0(A+B)$$

Теперь подставим наши допущения ($B=0,\ C=0$) и выразим каппу

$$\varkappa=2i\varkappa_0\frac{A+B}{(A-B)-(C-D)}=2i\varkappa_0\frac{A}{A-(1-D)}=i\varkappa_0\frac{A}{A-1}.$$

Тут последнее равенство последовало из непрерывности в нуле: $A+0=1+D$. И чтобы научиться сравнивать амплитуды возьмём и выразим их все через $\varkappa$ и $\varkappa_0$, что мы уже можем сделать:

$$A=\frac{\varkappa}{\varkappa-i\varkappa_0}, \qquad D=\frac{i\varkappa_0}{\varkappa-i\varkappa_0}.$$

Теперь введем такое понятие как плотность потока вероятности, что, если грубо обобщать, является отголоском уравнения непрерывности из какой-нибудь механики сплошной среды или теории поля. И так по определению

$$j(x)=-\frac{i\hbar}{2m}(\psi'\psi^*-\psi\psi'^*).$$

А так же коэффициенты прохождения и отражения соответственно

$$T_u=\left|\frac{j_{\text{out}}}{j_{\text{in}}}\right|, \qquad R_u=\left|\frac{j_{\text{back}}}{j_{\text{in}}}\right|.$$

Где подписи *in*, *out*, *back* соответствуют пришедшей, прошедшей, отразившейся волне, а в нашем случае коэффициентам потокам вероятности от волновой функции с коэффициентами $C,\ A,\ D$ соответственно.

$$\begin{aligned} j_{in}=j[e^{i\varkappa x}] &= -\frac{i\hbar}{2m}(i\varkappa+i\varkappa) &&= \frac{\hbar\varkappa}{m} \\ j_{out}=j[Ae^{i\varkappa x}] &= -\frac{i\hbar}{2m}|A|^2(i\varkappa+i\varkappa) &&= \frac{\hbar\varkappa}{m\left(\left(\frac{\varkappa}{\varkappa_0}\right)^2+1\right)} \\ j_{back}=j[De^{-i\varkappa x}] &= -\frac{i\hbar}{2m}|D|^2(-i\varkappa-i\varkappa) &&= -\frac{\hbar\varkappa}{m\left(\left(\frac{\varkappa}{\varkappa_0}\right)^2+1\right)} \end{aligned}$$

И тогда

$$\boxed{T=\left|\frac{j_{\text{out}}}{j_{\text{in}}}\right|=\frac{\varkappa^2}{\varkappa^2+\varkappa_0^2}} \qquad \boxed{R=\left|\frac{j_{\text{back}}}{j_{\text{in}}}\right|=\frac{\varkappa_0^2}{\varkappa^2+\varkappa_0^2}}.$$

в) Честно, трудно понять, что автор задания имеет в виду под вероятностью "ионизации". Самое правдоподобное — вылет электрона из ямы при таком её резком изменении, что по аналогии с отрыванием электрона от атома её ионизует.

То есть при резком изменении параметра глубины ямы, у нас также резко изменится собственная волная функция, состояния наших электронов, тогда, вероятность того, что из ямы что-то вылетит это просто

$$W=1-|\langle\psi_1|\psi_0\rangle|^2=1-\frac{4\varkappa_0\varkappa_1}{(\varkappa_0+\varkappa_1)^2}=\left(\frac{\varkappa_0-\varkappa_1}{\varkappa_0+\varkappa_1}\right)^2.$$

T4

б) потенциальная яма

И так, зададим потенциальную яму и эволюцию нашей системы

$$U(x)=\begin{cases}-U_0\ , & |x|<a/2\\ \quad 0\ , & |x|>a/2\end{cases} \qquad \Rightarrow \qquad \begin{aligned} &\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)+(U_0+E)\psi(x)=0\ , && |x|<a/2 \\ &\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)+E\psi(x)=0\ , && |x|>a/2 \end{aligned}$$

Мы смотрим на энергию в несвязном состоянии, то есть $E > 0$, получаем волновую функцию

$$\psi(x) = \begin{cases} 1 \cdot e^{ik_1 x} + Ae^{-ik_1 x} \ , & x < a/2 \\ Be^{ik_2 x} + Ce^{-ik_2 x} \ , & |x| < a/2 \\ De^{ik_1 x} + 0 \cdot e^{-ik_1 x} \ , & x > a/2 \end{cases} \qquad k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \qquad k_2^2 = \frac{2m(E+U_0)^2}{\hbar^2}.$$

Где аналогично Т3, мы выбираем волну падающую из $-\infty$ с единичной амплитудой, и соответсвенно из $+\infty$ к нам ничего не приходит.

Теперь на каждой границе нам нужно взять граничные условия

$$\begin{cases} \psi(\frac{a}{2} - \varepsilon) = \psi(\frac{a}{2} + \varepsilon) \\ \psi(-\frac{a}{2} - \varepsilon) = \psi(-\frac{a}{2} + \varepsilon) \\ \psi'(\frac{a}{2} - \varepsilon) = \psi'(\frac{a}{2} + \varepsilon) \\ \psi'(-\frac{a}{2} - \varepsilon) = \psi'(-\frac{a}{2} + \varepsilon) \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} Be^{ik_2 a/2} + Ce^{-ik_2 a/2} = De^{ik_1 a/2} \\ e^{-ik_1 a/2} + Ae^{ik_1 a/2} = Be^{ik_2 a/2} + Ce^{ik_2 a/2} \\ k_1 e^{-ik_1 a/2} - k_1 A e^{ik_1 a/2} = k_2 B e^{-ik_2 a/2} - k_2 C e^{ik_2 a/2} \\ k_1 D e^{ik_1 a/2} = k_2 B e^{ik_2 a/2} - k_2 C e^{-iak_2 a/2} \end{cases}$$

В этот раз мы покажаем какие-то алгебраические выкладки, которые ведут к свету, но на самом деле *Wolfram Mathematica* нам в помощь. Удобно заменить экспоненты в степенях k_1 и k_2 на соответсвующие α_i, тогда каким-нибудь Гауссом, система решиться. Здесь приведем просто, что досчитать это реально

$$\begin{cases} B\alpha_2 + \dfrac{C}{\alpha_2} = D\alpha_1 \\ \dfrac{1}{\alpha_1} + A\alpha_1 = \dfrac{B}{\alpha_2} + C\alpha_2 \\ \dfrac{k_1}{\alpha_1} - Ak_1\alpha_1 = \dfrac{k_2 B}{\alpha_2} - k_2 C\alpha_2 \\ D\alpha_1 k_1 = B\alpha_2 k_2 - \dfrac{Ck_2}{\alpha_2} \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \ldots (\text{мы в вас верим})$$

Куда полезней, сейчас понять, что если помучиться и решить данную систему, то мы по сути и найдём ответ на задачу, ведь

$$j_{\text{in}}[e^{ik_1 x}] = -\frac{i\hbar}{2m}(ik_1 + ik_1) = \frac{\hbar k_1}{m}, \qquad j_{\text{out}}[De^{ik_1 x}] = |D|^2 \frac{\hbar k_1}{m}, \qquad j_{\text{back}}[Ae^{-ik_1 x}] = |A|^2 \frac{-\hbar k_1}{m},$$

То есть in – падающая волна, амплитуду которой мы выбрали единицей, out – ушедшая в $+\infty$ с амплитудой D и *back* отразившаяся обратно в $-\infty$.

Коэффициенты из той системы получаются и соответственно

$$R = \left| \frac{j_{\text{back}}}{j_{\text{in}}} \right| = |A|^2 = \frac{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin k_1 a}{4k_2^2 k_1^2 + (k_1^2 + k_2^2)^2 \sin^2 k_1 a},$$

$$T = \left| \frac{j_{\text{out}}}{j_{\text{in}}} \right| = |D|^2 = \frac{4k_1^2 k_2^2}{4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_1 a}.$$

а) потенциальный барьер

Всё остаётся почти таким же, только сейчас проследим за сменой знаков кое-где

$$U(x) = \begin{cases} U_0 \ , \ |x| < a/2 \\ \ 0 \ , \ |x| > a/2 \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} &\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + (E - U_0)\psi(x) = 0 \ , \quad && |x| < a/2 \\ &\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + E\psi(x) = 0 \ , && |x| > a/2 \end{aligned}$$

Теперь если аналогично предыдущему пункту начать решать задачу, то заметим, что нужно лишь заменить одну! переменную $k_1 \mapsto \varkappa_1 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)$. При чем, $0 < E < U_0$. И тогда по аналогии $k_1 = i\varkappa_1$ получаем:

$$R = \frac{(\varkappa_1^2 + k_2^2)^2 sh^2 \varkappa_1 a}{4\varkappa_1^2 k_2^2 + (\varkappa_1 + k_2^2)^2 sh^2 \varkappa_1 a}, \qquad T = \frac{4\varkappa_1^2 k_2^2}{4\varkappa_1^2 k_2^2 + (\varkappa_1^2 + k_2^2)^2 sh^2 \varkappa_1 a}.$$

И главное что в прошлом пункте, что сейчас мы получаем сумму $R + T = 1$ что и ожидается.

T5

I. Найдём уровни энергии и волновые функции связанных состояний ($E<0$) частицы в поле

$$U(x) = -\frac{\hbar^2\varkappa_0}{m}\Big(\delta(x+a)+\delta(x-a)\Big).$$

Гамильтониан системы и стационарное уравнение Шрёдингера:

$$H = -\frac{\hbar^2\partial_x^2}{2m} + U(x), \qquad -\frac{\hbar^2\partial_x^2}{2m}\psi(x) + U(x)\psi(x) = -|E|\psi(x),$$

далее считая $E=-E$, будем решать уравнение

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

В местах, где не происходит скачков производной подходит в качестве решения экспонента, так что будем искать решение в виде

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\varkappa(x+a)}, & x<-a \\ Be^{-\varkappa(x+a)} + Ce^{\varkappa(x-a)}, & |x|<a \\ De^{-\varkappa(x-a)}, & x>a. \end{cases}$$

где введено $\varkappa^2 = 2mE/\hbar^2$.

Внимательно приглядевшись к виду $\psi(x)$ понимаем, что $e^{\varkappa a}$ можно спокойно закинуть в константы, что немного упростит вид уравнений:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\varkappa x}, & x<-a \\ Be^{-\varkappa x} + Ce^{\varkappa x}, & |x|<a \\ De^{-\varkappa x}, & x>a. \end{cases}$$

Можно было бы заметить, что потенциал симметричен, а значит можно искать решение уравнения Шредингера, как собственные функции оператора инверсии: четные и нечетные решения ($A=D$, $B=C$ и $A=-D$, $B=-C$), но мы пойдём другим путём, чтобы посмотреть, как из уравнений вылезет симметрия задачи.

Чтобы найти $\psi(x)$ запишем условия непрерывности и, интегрируя стационарное уравнение Шредингера, уравнение на скачок производной:

$$\left.\begin{aligned} \psi(-a+\varepsilon) &= \psi(-a-\varepsilon), \\ \psi(a+\varepsilon) &= \psi(a-\varepsilon), \\ \psi'(-a+\varepsilon) - \psi'(-a-\varepsilon) &= -2\varkappa_0\psi(-a) \\ \psi'(a+\varepsilon) - \psi'(a-\varepsilon) &= -2\varkappa_0\psi(a) \end{aligned}\right\} \quad\Rightarrow\quad \left.\begin{aligned} A - C - Be^{2a\varkappa} &= 0 \\ B - D + Ce^{2a\varkappa} &= 0 \\ -A + C - Be^{2a\varkappa} + 2A\varkappa_0/\varkappa &= 0 \\ B - D - Ce^{2a\varkappa} + 2d\varkappa_0/\varkappa &= 0 \end{aligned}\right\}$$

Для удобства введем $X=e^{2a\varkappa}$, и выразив из первого уравнения A, из второго B, из третьего C подставим и получим уравнение вида

$$\frac{D\varkappa(\varkappa-\varkappa_0)}{(\varkappa-\varkappa_0)+\varkappa_0X^{-2}} = d\varkappa_0, \quad\Rightarrow\quad \varkappa^2 - 2\varkappa\varkappa_0 + \varkappa_0^2 - \frac{\varkappa_0^2}{X^2} = 0, \quad\Rightarrow\quad \boxed{\varkappa_\pm = (1\pm e^{-2a\varkappa})\varkappa_0}, \tag{1}$$

что составляет условие совместности полученной СЛУ,

Забавный факт: составим матричку для СЛУ и найдём определитель

$$M = \begin{pmatrix} 1 & -X & -1 & 0 \\ 0 & 1 & X & -1 \\ \varkappa-2\varkappa_0 & \varkappa X & -\varkappa & 0 \\ 0 & \varkappa & -\varkappa X & 2\varkappa_0-\varkappa \end{pmatrix}, \qquad \det M = 4(X^2(\varkappa-\varkappa_0)^2 - \varkappa_0^2).$$

Решение уравнения $\det M = 0$ относительно $\varkappa$ приводит к тем же корням, что и уравнение (1): $\varkappa = (1\pm e^{-2A\varkappa})\varkappa_0$, таким образом СЛУ будет совместна, если вырождена.

Стоит заметить, что $\operatorname{rg} M(\varkappa_\pm) = 3$, тогда, решая уравнение относительно A,B,C, находим

$$\varkappa_+: \qquad A=D,\ B=C=\frac{A}{1+e^{2a\varkappa}}, \qquad \text{четное решение}$$

$$\varkappa_-: \qquad A=-D,\ B=-C=-\frac{A}{-1+e^{2a\varkappa}}, \qquad \text{нечетное решение}$$

Для наглядности можем их построить[4] .

[4]Само собой зависимость $\psi(x)$ от x.

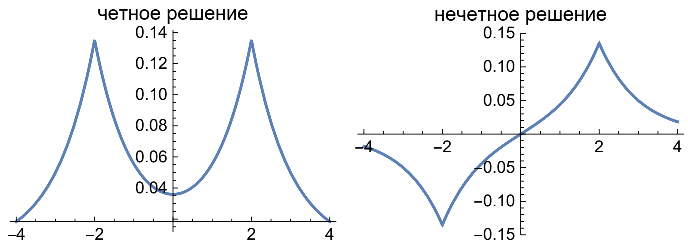


Рис. 2: Четное и нечётное решение к Т5

Нормировка. Для нахождения волновой функции, найдём коэффициент A из нормируемости на 1:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_+(x)|^2\,dx = 1, \quad \Rightarrow \quad A_+^2 = \frac{\varkappa}{2}\frac{(1+e^{2a\varkappa})^2}{1+e^{2a\varkappa}+2a\varkappa}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_-(x)|^2\,dx = 1, \quad \Rightarrow \quad A_-^2 = \frac{\varkappa}{2}\frac{(-1+e^{2a\varkappa})^2}{-1+e^{2a\varkappa}-2a\varkappa}$$

Таким образом нашли собственные функции к этой задаче.

Стоит вспомнить, что уравнение (1) – трансцендентное уравнение, где $\varkappa = \varkappa(E)$, то есть уравнение на уровни энергии. Как мы показали, $\varkappa_+$ соответствует четному решению и $\varkappa_-$ нечётному, из достаточно убедительного рисунка[5] №3 видно, что $E^+ > E^-$.

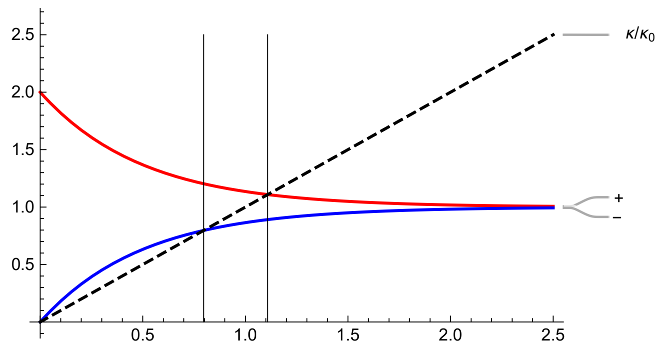


Рис. 3: Решение трансцендентного уравнения к Т5

Далекие ямы. Рассмотрим предельный случай $\varkappa_0 a \gg 1$, соответствующий достаточно далёким ямам, тогда $\varkappa_+ \approx \varkappa_- \approx \varkappa_0$, то есть система вырождается по энергии.

Вероятность перехода. В силу существования чётного и нечётного решения, можем построить состояния, соответствующие нахождению в правой (ψ_a) и левой (ψ_{-a}) ямах:

$$\begin{cases} \psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_+ + \psi_-); \\ \psi_{-a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_+ - \psi_-); \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_a + \psi_{-a}); \\ \psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_a - \psi_{-a}). \end{cases}$$

Теперь, из уравнения Шрёдингера, найдём эволюцию во времени для собственных состояний:

$$i\hbar\partial_t\psi = \hat{H}\psi = -E\psi, \quad \Rightarrow \quad \psi_+(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_+t}\psi_+(x), \quad \psi_-(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_-t}\psi_-(x).$$

Для состояния ψ_a найдём зависимость от времени в базисе ψ_a, ψ_{-a}:

$$\psi_a(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_+(x,t)+\psi_-(x,t)) = \frac{1}{2}\left(\psi_a(x)\left(e^{-iE^+t/\hbar}+e^{-iE^-t/\hbar}\right)+\psi_{-a}(x)\left(e^{-iE^+t/\hbar}-e^{-iE^-t/\hbar}\right)\right).$$

Вероятность перехода можем найти, как

$$P = |\langle\psi_a(x,t)|\psi_{-a}(x)\rangle|^2 = \left|\frac{1}{2}\underbrace{\left(\int|\psi_{-a}|^2\,dx\right)}_{\equiv 1}\left(e^{-iE^+t/\hbar}-e^{-iE^-t/\hbar}\right)\right|^2 = \sin^2\left(\frac{E^+-E^-}{2\hbar}t\right).$$

Можем чуть более явно найти вероятность, считая $\varkappa_0 a \gg 1$, тогда

$$\varkappa_+^2 \approx \varkappa_0^2 + \frac{2\varkappa_0^2}{e^{2\varkappa_0 a}}, \quad \varkappa_-^2 \approx \varkappa_0^2 - \frac{2\varkappa_0^2}{e^{2\varkappa_0 a}}, \quad \Rightarrow \quad P = \sin^2\left(\frac{\varkappa_0^2\hbar}{m}e^{-2\varkappa_0 a}t\right).$$

[5]Где по Ox отложена $\varkappa \sim \sqrt{E}$, оси действительно полезно подписывать.

Т6

Возьмём операторы импульса $\hat{p} = -i\hbar\partial/\partial x$ и координаты $\hat{x}$. Сразу найдём их средние и коммутатор

$$\bar{x} = \langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle, \qquad \bar{p} = \langle\psi|\hat{p}|\psi\rangle, \qquad [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar\mathbb{E}.$$

Если сейчас ввести такие величины, у которых ещё и оказывается коммутатор тот же

$$\hat{\varkappa} = \hat{x} - \bar{x}, \qquad \hat{\varpi} = \hat{p} - \bar{p} \qquad [\hat{\varkappa}, \hat{\varpi}] = i\hbar\mathbb{E}.$$

Это ещё что[6], самое главное ещё и что помимо $\bar{\varpi} = \bar{\varkappa} = 0$, так ещё

$$(\Delta\varkappa)^2 = \langle\psi|(\hat{\varkappa} - \bar{\varkappa})|\psi\rangle = \langle\psi|(\hat{x} - \bar{x})|\psi\rangle = (\Delta x)^2, \qquad (\Delta\varpi)^2 = (\Delta p)^2.$$

Теперь введем функции по методу Вейля

$$|\Phi\rangle = (\hat{\varkappa} - i\gamma\hat{\varpi})\,|\Psi\rangle\,.$$

И так как по определению нормы $\langle\Phi|\Phi\rangle \geqslant 0$ получим

$$\langle\psi|(\hat{\varkappa} - i\gamma\hat{\varpi})^\dagger(\hat{\varkappa} - i\gamma\hat{\varpi})|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{\varkappa}^2 - i\gamma(\hat{\varkappa}\hat{\varpi} - \hat{\varpi}\hat{\varkappa}) + \gamma^2\hat{\varpi}^2|\psi\rangle \geqslant 0.$$

А значит неотрицательной должно быть и выражение

$$(\Delta x)^2 + \hbar\gamma\langle\mathbb{E}\rangle + \gamma^2(\Delta p)^2) \geqslant 0 \qquad \Rightarrow \qquad \hbar^2 - 4(\Delta p)^2(\Delta x)^2 \leqslant 0,$$

что получилось просто из условия на дискриминант для квадратного уравнения на γ, тогда минимум достигнется просто при нулевом дискриминанте

$$(\Delta p)^2(\Delta x)^2 = \frac{\hbar}{4}, \qquad \gamma = -2\frac{(\Delta x)^2}{\hbar}.$$

Таким образом и нашли волновую функцию, которая удовлетворяет минимизации соотношения неопределенности, что мы четко и показали

$$|\Phi\rangle = [\hat{x} - \bar{x} + i\frac{2}{\hbar}(\Delta x)^2(\hat{p} - \bar{p})]\,|\Psi\rangle\,.$$

Т7

Рассмотрим движение в потенциальном поле

$$U(x) = -\frac{\hbar^2\varkappa_0}{m}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\delta(x - na).$$

Запишем стационарное уравнение Шрёдингера

$$\hat{H} = -\tfrac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + U(x), \qquad \hat{H}\psi(x) = E\psi(x).$$

Подставляя, находим

$$\psi''(x) - \tfrac{2m}{\hbar^2}\left(U(x) - E\right)\psi(x) = 0, \qquad \Rightarrow \qquad \psi(x) = \begin{cases} \alpha_1 e^{ikx} + \beta_1 e^{-ikx}, & x \in [0, a]; \\ \alpha_2 e^{ik(x-a)} + \beta_2 e^{-ik(x-a)}, & x \in [a, 2a]; \end{cases}$$

где рассмотрели решение на двух областях: $[0, a]$ и $[a, 2a]$, и ввели $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$.

Запишем условие на непрерывность $\psi(x)$ и скачок первой производной

$$\left.\begin{aligned} \psi(a+\varepsilon) = \psi(a-\varepsilon), \\ \psi'(a+\varepsilon) - \psi'(a-\varepsilon) = -2\varkappa_0\psi(a), \end{aligned}\right\} \qquad \Rightarrow \qquad \begin{pmatrix}\alpha_2\\ \beta_2\end{pmatrix} = A\begin{pmatrix}\alpha_1\\ \beta_1\end{pmatrix}, \qquad A = \begin{pmatrix} e^{ika}\left(1 - \frac{\varkappa_0}{ik}\right) & -e^{-ika}\frac{\varkappa_0}{ik} \\ e^{ika}\frac{\varkappa_0}{ik} & e^{-ika}\left(1 + \frac{\varkappa_0}{ik}\right) \end{pmatrix}$$

Здесь, для удобства, ввели связь коэффициентов через матрицу A.

В силу периодичности потенциала, $[\hat{H}, \hat{T}_a] = 0$, и решение может быть найдено в виде функций Блоха[7]

$$U(x+a) = U(x), \qquad \Rightarrow \qquad \psi(x+a) = e^{iKa}\psi(x).$$

Тогда, подставляя предполагаемое решение, находим

$$\begin{pmatrix}\alpha_2\\ \beta_2\end{pmatrix} = e^{iKa}\begin{pmatrix}\alpha_1\\ \beta_1\end{pmatrix}.$$

[6]это \varpi, классно выглядит же

[7]Действительно, $\psi(x) = e^{Ka}F(x)$, где $F(x+a) = F(x)$, тогда $\psi(x+a) = e^{iKa}\psi(x)$.

Получается, матрица A должна быть скалярна, чего можем добиться дополнительными условиями на α и β:

$$\lambda^2 - (\operatorname{tr} A)\lambda + \det(A) = 0, \qquad \operatorname{tr} A = e^{ika}\left(1 - \tfrac{\varkappa_0}{ik}\right) + e^{-ika}\left(1 + \tfrac{\varkappa_0}{ik}\right) \overset{\text{def}}{=} 2\rho, \qquad \det A = 1.$$

Подставляя условие из $[\hat{H}, \hat{T}_a] = 0$, находим

$$\lambda_{1,2} = e^{\pm iKa} = \rho \pm i\sqrt{1-\rho^2},$$

что, вроде, носит гордое имя дисперсионного соотношения. Подставляя[8] ρ находим выражение для K:

$$\cos(Ka) = \cos(ka) - \tfrac{\varkappa_0}{k}\sin(ka).$$

Так как $Ka \in \mathbb{R}$, то дисперсионное соотношение становится условием на допустимые значения энергии и, из уравнения и достаточно убедительного рисунка, можем сделать вывод о разрешенных зонах. Действительно, для того, чтобы зона была разрешенной необходимо, чтобы

$$|\cos(k[E]a) - \tfrac{\varkappa_0}{k[E]}\sin(k[E]a)| < 1, \tag{2}$$

на что чуть подробнее посмотрим в предельных случаях.

Построим $|\cos(k[E]a) - \frac{\varkappa_0}{k[E]}\sin(k[E]a)|$ для $\varkappa_0 a \ll 1$ (слабая связь) и $\varkappa_0 a \gg 1$ (сильная связь). Видно, что слабой связи соответствует почти непрерывный спектр $\cos(Ka) \approx \cos(ka)$ и $K \approx k + \frac{2\pi n}{a}$, а сильная связб приводит к почти дискретному спектру с $ka \approx \pi n$.

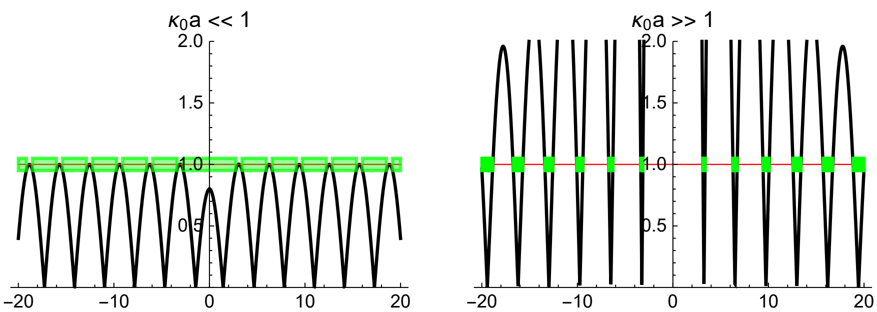


Рис. 4: Слабая и сильная связь в задаче Т7

По определению, эффективной массой частицы называется

$$m^* \overset{\text{def}}{=} \hbar^2 \left(\frac{d^2E}{dK^2}\right)^{-1},$$

где $\hbar K$ – квазиимпульс.

Считая k малым, находим

$$\frac{1}{6}k^2\left(a^3\varkappa_0 - 3a^2\right) - a\varkappa_0 + 1 = \cos(aK), \qquad \Rightarrow \qquad E(K) = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{6}{a^2}\frac{1-\cos(Ka) - a\varkappa_0}{3 - \varkappa_0 a}.$$

Тогда эффективная масса система равна

$$E''_{KK} = \frac{3\hbar^2\cos(aK)}{m\,(3 - a\varkappa_0)}, \qquad \Rightarrow \qquad m^* = m\frac{1 - a\varkappa_0/3}{\cos(aK)},$$

которое $a\varkappa_0 \ll 1$ и $aK \ll 1$ переходит в классический случай!

Т8

Рассмотрим связанное сферически симметричное состояние частицы в сфрически симметричной потенциальной яме, вида

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & r < r_0, \\ 0, & r \geqslant r_0, \end{cases}$$

в частности случаи $\dim \in \{1, 2, 3\}$.

[8]Имеет смысл выразить $\rho = \cos(ak) - \frac{\varkappa_0}{k}\sin(ak)$.

Как обычно, запищем стационарное уравнение Шрёдингера, в силу связного состояния ($E < 0$)переобозначим $E \to -E$:

$$\hat{H}\psi = \left(\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + U\right)\psi = -E\psi, \quad \Rightarrow \quad \triangle\psi - \frac{2m}{\hbar^2}(U+E)\psi = 0.$$

Раскрывая $U(r)$, выделяем две области:

$$\begin{cases} \triangle\psi + k^2\psi = 0, & r < r_0; \\ \triangle\psi - \varkappa^2\psi = 0, & r > r_0; \end{cases} \qquad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E), \quad \varkappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E.$$

Осталось раскрыть лапласиан, считая $\psi \equiv \psi(r)$ (сферически симметричное состояние)

$$\triangle|_{\dim=1} = \partial_r^2, \quad \triangle|_{\dim=2} = \tfrac{1}{r}\partial_r + \partial_r^2, \quad \triangle|_{\dim=3} = \tfrac{2}{r}\partial_r + \partial_r^2.$$

Одномерный случай. Подробно разобран в Т2, здесь ограничимся только указанием итоговой охапки диффуров и ответа:

$$\begin{cases} \psi'' + k^2\psi = 0, & r < r_0; \\ \psi'' - \varkappa^2\psi = 0, & r > r_0; \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \psi^+(r) = \begin{cases} A\cos(kr), & r < r_0; \\ Be^{-\varkappa r}, & r > r_0; \end{cases} \qquad \psi^-(r) = \begin{cases} A\sin(kr), & r < r_0; \\ Be^{-\varkappa r}, & r > r_0; \end{cases}$$

где ψ^+ и ψ^- – четное и нечетное решение (в силу симметричности потенциала), а A и B известны из условий нормировки, непрерывности и гладкости.

Двухмерный случай. Дифференциальное уравнение на $\psi(r)$ примет вид

$$\begin{cases} \psi'' + \frac{1}{r}\psi' + k^2\psi = 0, \\ \psi'' + \frac{1}{r}\psi' - \varkappa^2\psi = 0. \end{cases}$$

В силу сферической симметрии задачи, решение может быть найден в виде функций Бесселя J_n и Y_n:

$$\psi(r) = \begin{cases} A_1 J_0(kr) + B_1 Y_0(kr), & r < r_0; \\ A_2 J_0(i\varkappa r) + B_2 Y_0(-i\varkappa r), & r > r_0. \end{cases}$$

В силу нормируемости ψ должно выполняться равенство $B_2 = A_2/i$.

Дальше вспоминаем, что $\psi(r \leqslant r_0)|_{r=r_0} = \psi(r \geqslant r_0)|_{r=r_0}$, также $\psi(r \leqslant r_0)'|_{r=r_0} = \psi(r \geqslant r_0)'|_{r=r_0}$, плюс $\int |\psi(r)|^2\, dr = 1$, что даёт нам три уравнения, на три коэффициента. Однако ожидается дискретность спектра, так что необходимо дополнительное условие, чтобы прийти к уравнению на E.

Можно также сказать, что волновой функции ненормально уходить в бесконечность (даже оставаясь L_2 интегрируемой), тогда $B_1 = 0$, и мы получаем дискретный спектр.

Трёхмерный случай. Попробуем найти решение в виде $\psi(r) = \mu(r)\nu(r)$, где $\mu(r) = \exp\left(-\int \frac{f(r)}{2}\, dr\right)$, иногда это помогает диффурах вида $F'' + f(r)F' + F = 0$:

$$\begin{cases} \psi'' + \frac{2}{r}\psi' + k^2\psi = 0, & r < r_0; \\ \psi'' + \frac{2}{r}\psi' - \varkappa^2\psi = 0, & r > r_0; \end{cases} \qquad \nu(r) = e^{-\ln r} = \tfrac{1}{r}, \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \nu'' + k^2\nu = 0, & r < r_0; \\ \nu'' - \varkappa^2\nu = 0, & r > r_0. \end{cases}$$

А такое уравнение на $\nu(r)$ уже решается, итого находим

$$\psi(r) = \begin{cases} \frac{A_1}{r}e^{-ikr} + \frac{B_1}{r}e^{ikr}, & r < r_0; \\ \frac{A_2}{r}e^{-\varkappa r} + \frac{B_2}{r}e^{\varkappa r}, & r > r_0. \end{cases}$$

Осталось наполнить это физическим смыслом: при $r > r_0$ требование нормировки приведет к $B_2 = 0$, при $r < r_0$ для наглядности перепишем в тригонометрических функциях:

$$\psi(r < r_0) = -\frac{iA_1\sin(kr)}{r} + \frac{A_1\cos(kr)}{r} + \frac{iB_1\sin(kr)}{r} + \frac{B_1\cos(kr)}{r}, \quad \Rightarrow \quad B_1 = -A_1,$$

из того же требования нормируемости функции.

Из непрерывности в $r = r_0$ находим:

$$\psi(r \leqslant r_0)|_{r=r_0} = \psi(r \geqslant r_0)|_{r=r_0}, \quad \Rightarrow \quad A_2 = -2iA_1 e^{r_0\varkappa}\sin(kr_0).$$

Выразив все коэффициенты через A_1, подставим их в условие глакзкости $\psi(r)$:

$$\psi(r \leqslant r_0)'|_{r=r_0} = \psi(r \geqslant r_0)'|_{r=r_0}, \quad \Rightarrow \quad k\cos(kr_0) + \varkappa\sin(kr_0) = 0, \quad \Rightarrow \quad \boxed{k[E] = -\varkappa[E]\cdot\mathrm{tg}\,(k[E]r_0)},$$

это трансцендентное уравнение на E имеет решения, соответсвенно выделяет дискретный спектр уровней энергии.

Осталось найти A_1 из условия нормировки, к сожалению через элементарные функции у меня это условие не выражается, возможно выше была вычислительная ошибка, но система ± физична. Для начала посчитаем плотность вероятности

$$|\psi(r<r_0)|^2 = \frac{4A_1^2\left(k\cos\left(k\left(r-r_0\right)\right)-\varkappa\sin\left(k\left(r-r_0\right)\right)\right)^2}{r^2\left(\varkappa^2+k^2\right)}, \qquad |\psi(r>r_0)|^2 = \frac{4A_1^2k^2e^{2\varkappa(r_0-r)}}{r^2\left(\varkappa^2+k^2\right)}.$$

тогда условие нормировки:

$$\int_0^{r_0}|\psi(r<r_0)|^2\,dr + \int_{r_0}^{\infty}|\psi(r>r_0)|^2\,dr = 1, \quad \Rightarrow \quad A_1^{-2} = 8e^{2\varkappa r_0}\,\mathrm{Ei}\left(-2r_0\varkappa\right)\sin(kr_0)^2 + 4k\,\mathrm{Si}\left(2kr_0\right),$$

где Si – интегральный синус, Ei – интегральная экспонента, таким образом нашли волновую функцию и уровни энергии:

$$\psi(r) = 2A_1\begin{cases}\sin(kr)/r, & r<r_0;\\ \sin(kr_0)\,e^{\varkappa(r_0-r)}/r, & r>r_0.\end{cases}$$

T9

Найдём уровни энергии трёхмерного изотропного гармонического осциллятора в ПДСК. Запишем уравнение Шрёдингера примет вид

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

и перейдём к безразмерным величинам

$$\hat{\boldsymbol{Q}} = \frac{\hat{\boldsymbol{q}}}{q_0}, \quad \hat{\boldsymbol{P}} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{p_0} = -i\partial_{\boldsymbol{Q}}, \qquad p_0 = \sqrt{m\omega\hbar}, \quad q_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad \Rightarrow \quad \hat{H}_Q = \frac{1}{2}\left(Q^2+\hat{P}^2\right) = \hat{H}/(\hbar\omega).$$

Для благоприятного разделения переменных[9] представим $\psi(x,y,z) = \psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z)$, и $E = E_x+E_y+E_z$:

$$\frac{1}{2}\left(x^2+y^2+z^2-\left(\partial_x^2+\partial_y^2+\partial_z^2\right)\right)\psi_x\psi_y\psi_z = \frac{1}{\hbar\omega}(E_x+E_y+E_z)\psi_x\psi_y\psi_z.$$

Нетрудно получить

$$\left(x^2-\frac{\psi_x''(x)}{\psi_x(x)}-\frac{2E_x}{\hbar\omega}\right)\psi_x\psi_y\psi_z + \ldots\left(z^2-\frac{\psi_z''(z)}{\psi_z(z)}-\frac{2E_z}{\hbar\omega}\right)\psi_x\psi_y\psi_z = 0,$$

таким образом переменные разделились и мы получили три независимых уравнения одномерных осцилляторов:

$$\begin{cases}\psi_x''(x)+\left(\frac{2E_x}{\hbar\omega}-x^2\right)\psi_x(x)=0,\\ \psi_y''(y)+\left(\frac{2E_y}{\hbar\omega}-y^2\right)\psi_y(y)=0,\\ \psi_z''(z)+\left(\frac{2E_z}{\hbar\omega}-z^2\right)\psi_z(z)=0.\end{cases} \quad \Rightarrow \quad E_i = \hbar\omega\left(\frac{1}{2}+n_i\right).$$

Так приходим к выражению для энергии изотропного гармонического осциллятора через число квантов по каждой из осей:

$$E = E_x+E_y+E_z = \hbar\omega\left(\frac{3}{2}+n_x+n_y+n_z\right),$$

где явно видно вырождение уровней энергии, при $n_x+n_y+n_z=n$. Нетруно посчитать[10] , что

$$\#(n) = \mathrm{card}\left\{(n_x,\,n_y,\,n_z)\mid n_x+n_y+n_z=n\right\} = \frac{(n+1)(n+2)}{2},$$

что и является кратностью вырождения.

Заметим, что $\#(0)=1$, $\#(1)=3$, $\#(2)=6$, тогда

$$2\cdot\big(\#(0)\big) = 2,$$
$$2\cdot\big(\#(0)+\#(1)\big) = 8,$$
$$2\cdot\big(\#(0)+\#(1)+\#(2)\big) = 20,$$

что намекает на некоторую связь с магическими числами (ЛЛ3, §118: модель оболочек).

T10

В нашем гармоническом осцилляторе посмотрим на коммутатор оператора уничтожения с гамильтонианом

$$[\hat{H},\hat{a}] = [\hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{1}{2}\right),\hat{a}] = \hbar\omega[\hat{a}^\dagger\hat{a},\hat{a}] = -\hbar\omega[\hat{a},\hat{a}^\dagger]\hat{a} = -\hbar\omega\hat{a}.$$

[9] Здесь и далее $\boldsymbol{Q} = (x,\,y,\,z)^{\mathrm{T}}$ – обезразмеренные для удобства перменные.
[10] $n \geqslant 0$.

Как видим, этот коммутатор не обращается в нуль, если собственное значение $\hat{a}$ – не ноль. То есть энергия такого состояния $|\alpha\rangle$ флуктуирует вокруг своего среднего значения[11]. Разложим это состояния по базису стационарных состояний

$$|\alpha\rangle = \sum_n C_n(\alpha)\,|n\rangle\,.$$

Найдём C_n из уравнения на собственные значения

$$C_n(\alpha) = \langle n|\alpha\rangle = \frac{1}{\alpha}\langle n|\hat{a}\,\alpha\rangle = \frac{1}{\alpha}\langle \hat{a}^\dagger n|\alpha\rangle$$

Сопряженный оператор уничтожения работает как

$$\hat{a}^\dagger\,|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle\,, \qquad (\hat{a}^\dagger\,|n\rangle)^\dagger = \langle n|\,\hat{a} = \left\langle \hat{a}^\dagger n\right|.$$

То есть получили рекурентную формулу с помощью которой C_n уже вычисляется

$$\alpha C_n(\alpha) = \sqrt{n+1}\langle n+1|\alpha\rangle = \sqrt{n+1}C_{n+1}(\alpha) \qquad \Rightarrow \qquad C_n(\alpha) = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}C_0(\alpha).$$

Теперь посмотрим на вид нашего разложения

$$|\alpha\rangle = C_0(\alpha)\sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\,|n\rangle = C_0(\alpha)\sum_n \frac{(\alpha\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}\,|0\rangle = C_0(\alpha) = e^{\alpha\hat{a}^\dagger}\,|0\rangle\,.$$

Теперь по условию единично нормировки находим $C_0(\alpha)$ и ликуем

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = |C_0(\alpha)|^2\langle 0|e^{\alpha^*\hat{a}}e^{\alpha\hat{a}^\dagger}\,|0\rangle = |C_0(\alpha)|^2\sum_n \frac{(\alpha^*\alpha)^n}{n!} = 1,$$

и тут под суммой снова удобный ряд

$$|C_0(\alpha)|^2 e^{|\alpha|^2} = 1 \qquad \Rightarrow \qquad C_0(\alpha) = e^{-|\alpha|^2/2}.$$

Окончательно получили

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}e^{\alpha\hat{a}^\dagger}\,|0\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}\sum_n \frac{\alpha^2}{\sqrt{n!}}\,|n\rangle\,.$$

Теперь мы готовы искать распределение по числу квантов, ведь вероятность, что в $|\alpha\rangle$ найдётся n квантов это

$$P_n = |\langle n|\alpha\rangle|^2 = \frac{|\alpha|^{2n}}{n!}e^{-|\alpha|^2} = \frac{\langle N\rangle^n}{n!}e^{-\langle N\rangle}.$$

Получили распределение Пуассона для числа квантов со средним значением $\langle N\rangle$.

[11] Эта энергия определена как $\langle E\rangle = \hbar\omega(\langle N\rangle + 1/2)$. А вот $\langle N\rangle = |\alpha|^2$

Дополнение к Т10

I. Пусть есть некоторое состояние, которое соответствует

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q_0 + iP_0), \qquad \hat{a}\,|\alpha\rangle = \alpha\,|\alpha\rangle\,.$$

В Т10 мы показали, что состояние $|\alpha\rangle$ можно разложить по базису собственных состояний $\hat{N}$: $\hat{N}\,|n\rangle = n\,|n\rangle$:

$$|\alpha\rangle = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) e^{\alpha\hat{a}^\dagger}\,|0\rangle = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\,|n\rangle\,,$$

где воспользовались представлением

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}\,|0\rangle\,.$$

Также можно переписать волновую функцию $|\psi\rangle$ в виде

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n\,|n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}\,|0\rangle = \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{c_n}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n\right)|0\rangle = f(\hat{a}^\dagger)\,|0\rangle\,.$$

То есть волновая функция может быть представлена, как действие $f(\hat{a}^\dagger)$ на состояние $|0\rangle$, где $f(x)$:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c_n}{\sqrt{n!}} x^n.$$

II. Посмотрим на действие операторов $\hat{a}^\dagger$ и $\hat{a}$ на $|\psi\rangle$ в новом представлении:

$$\hat{a}\,|\psi\rangle = \hat{a} f(\hat{a}^\dagger)\,|0\rangle = f(\hat{a}^\dagger)\underbrace{\hat{a}\,|0\rangle}_{\equiv 0} + f'(\hat{a}^\dagger)\,|0\rangle = f'(\hat{a}^\dagger)\,|0\rangle\,, \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{\hat{a} \overset{*}{=} \partial_{\hat{a}^\dagger}, \quad \hat{a}^\dagger \overset{*}{=} \hat{a}^\dagger}.$$

где воспользовались равенствами из У10:

$$[\hat{a},\, (\hat{a}^\dagger)^n] = n(\hat{a}^\dagger)^{n-1}, \qquad \left[\hat{a},\, f(\hat{a}^\dagger)\right] = f'(\hat{a}^\dagger).$$

Когерентные состояния. Перепишем в новых обозначениях уравнения для когерентного состояния:

$$\hat{a}\,|\alpha\rangle = \alpha\,|\alpha\rangle\,, \qquad \Rightarrow \qquad f' = \alpha f.$$

Нетрудно получить, что

$$f(x) = Ce^{\alpha x}, \qquad \Rightarrow \qquad |\alpha\rangle = Ce^{\alpha\,\hat{a}^\dagger}\,|0\rangle = C\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!}(\hat{a}^\dagger)^n\,|0\rangle = C\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\,|n\rangle\,,$$

где нужжно поправить нормировку:

$$\|\alpha\|^2 = |C|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha\bar{\alpha})^n}{n!} = |C|^2 e^{|\alpha|^2}, \qquad \Rightarrow \qquad |\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}\cdot e^{\alpha\,\hat{a}^\dagger}\,|0\rangle\,.$$

Смысл. Рассмотрим проекцию $|\psi\rangle = f(\hat{a}^\dagger)\,|0\rangle$, на когерентное состояние $|\alpha\rangle$:

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}\cdot e^{\alpha\,\hat{a}^\dagger}\,|0\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\,|n\rangle\,, \qquad |\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}\,|0\rangle = f(\hat{a}^\dagger)\,|0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x)|_{x=0}}{\sqrt{n!}}\,|n\rangle\,.$$

скалярно перемножая, находим:

$$\langle\alpha|\psi\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty} \frac{c_n\alpha^n}{\sqrt{n!}} = e^{-|\alpha|^2/2}\cdot f(\alpha).$$

Разбиение единицы. Вспомним, что

$$\alpha = \frac{Q_0 - iP_0}{\sqrt{2}}, \qquad \hat{a}^\dagger = \frac{\hat{Q} - i\hat{P}}{\sqrt{2}}, \qquad |f\rangle = f(\hat{a}^\dagger)\,|0\rangle\,.$$

Посмотрим на скалярное произведение:

$$\langle f_2|f_1\rangle = \int_{\mathbb{C}} \bar{f}_2(\alpha) f_1(\alpha) e^{-|\alpha|^2}\,d\alpha\,d\bar{\alpha}, \qquad \psi(x) = \langle x|f(\hat{a}^\dagger)|0\rangle \;\sim\; F(\alpha) = e^{-|\alpha|^2/2} f(\alpha).$$

В этих терминах и посмотрим на матричный элемент для $\hat{a}^\dagger$:

$$\langle F_2|\hat{a}^\dagger|F_1\rangle = \int_{\mathbb{C}} \bar{F}_2(\alpha)\,\alpha\,F_1(\alpha)\,d\alpha\,d\bar{\alpha},$$

и для $\hat{a}$:

$$\langle F_2|\hat{a}|F_1\rangle = \int_{\mathbb{C}} e^{-|\alpha|^2}\,\bar{f}_2(\alpha)\partial_\alpha f_1(\alpha)\,d\alpha\,d\bar{\alpha} = \Big/\text{по частям}\Big/ = \int_{\mathbb{C}} \bar{F}_2(\alpha)\,\bar{\alpha}\,F_1(\alpha)\,d\alpha\,d\bar{\alpha}.$$

Сжатые состояния

Общее когерентное состояния для пары операторов координата-импульс должно удовлетворять уравнению
$$(\hat{x}+i\gamma\hat{p})\,|\psi\rangle=\alpha\,|\psi\rangle\,,$$
в котором $\gamma=\frac{q_0}{p_0}=\frac{1}{m\omega}$ – когерентные состояния гармонического осциллятора.

Можем посмотреть на друние γ, которым соответствуют более/менее широкие гауссовы распределения, чем для основного состояния осциллятора – *сжатые состояния осциллятора*, которые получим изменением масштаба по координате.

Построим оператор сжатия: сжатие по x – сдвиг по $\ln|x|$, а значит генератор преобразования имеет вид
$$\hat{G}_0=-i\hbar\partial_{\ln|x|}=-i\hbar x\partial_x=\hat{x}\hat{p},$$
что достаточно забавно, хотя оператор и не эрмитов, но при этом:
$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}k\hat{G}_0\right)\psi(x)=\psi(e^k x).$$
Квадрат нормы при этом тоже уменьшается, так что добавим константу так, чтобы новый оператор оказался эрмитовым:
$$\hat{G}=-i\hbar\left(x\partial_x+\tfrac{1}{2}\right)=\hat{x}\hat{p}-\frac{i\hbar}{2}=\frac{1}{2}\left(\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x}\right)=-i\hbar\frac{\hat{a}^2-(\hat{a}^\dagger)^2}{2},$$
с автоматически унитарной экспонентой:
$$\hat{D}_k=\exp\left(\frac{i}{\hbar}k\hat{G}\right)=\exp\left(\frac{k}{2}\left(\hat{a}^2-(\hat{a}^\dagger)^2\right)\right),\qquad \hat{D}_k\psi(x)=e^{k/2}\psi(e^k x).$$
Теперь удобно проследить за эволюцией сжатого состояния:
$$|\psi_k\rangle=\hat{D}_k\,|\psi\rangle\,,\qquad |\psi_k(t)\rangle=\hat{U}_t\hat{D}_k\hat{U}_t^{-1}\hat{U}_t\,|\psi\rangle=\hat{D}_k^{\mathrm{H}}(-t)\,|\psi(t)\rangle\,,$$
где можем найти явный вид оператора сжатия в представлении Гейзенберга:
$$\hat{D}_k^{\mathrm{H}}(-t)=\exp\left(\frac{k}{2}\hat{a}_{\mathrm{H}}^2(-t)-\frac{k}{2}\hat{a}_{\mathrm{H}}^{\dagger\,2}(-t)\right)=\exp\left(\frac{k}{2}e^{2i\omega t}\hat{a}^2-\frac{k}{2}e^{-2i\omega t}(\hat{a}^\dagger)^2\right).$$
Итого, сжатое состояние со временем оказывается не когерентным для $\hat{P},\hat{Q}$, но когерентным для
$$\hat{Q}_{\mathrm{H}}(t)=\cos(\omega t)\hat{Q}+\sin(\omega t)\hat{P},$$
$$\hat{P}_{\mathrm{H}}(t)=\cos(\omega t)\hat{P}-\sin(\omega t)\hat{Q}.$$

Матричный элемент оператора эволюции. Действительно, в представлении когерентных состояний:
$$\langle\beta|\hat{U}|\alpha\rangle=\exp\left(\bar{\beta}\alpha e^{i\omega t}\right).$$
Чуть хуже в координатном предсталении:
$$\langle x|\hat{U}|y\rangle=\int_{\mathbb{C}^2}\frac{d\alpha\,d\bar{\alpha}}{2\pi i}\frac{d\beta\,d\bar{\beta}}{2\pi i}\exp\left(-\alpha\bar{\alpha}-\beta\bar{\beta}-\frac{x^2}{2}+\sqrt{2}\beta x-\frac{\beta^2}{2}-\frac{y^2}{2}+\sqrt{2}\bar{\alpha}y-\frac{\bar{\alpha}^2}{2}+\bar{\beta}\alpha e^{i\varphi}\right)=\frac{1}{8}\frac{\exp\left(-i\frac{\left(x^2+y^2\right)\cos\varphi-2xy}{2\sin\varphi}\right)}{|\sin\varphi|}$$

Атом водорода

A. Волновая функция водорода имеет вид

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n\cdot(n+l)!}}\left(\frac{2}{na_0}\right)^{3/2}\exp\left(-\frac{r}{na_0}\right)\left(\frac{2r}{na_0}\right)^l L^{2l+1}_{n-l-1}\left[\frac{2r}{na_0}\right]\times Y_{l,m}(\theta,\varphi),$$

где сферические функции

$$Y_{l,m}=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}\Theta_{l,m}(\theta),\qquad \Theta(\theta)_{l,m}=\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}P^m_l[\cos\theta],$$

где P^m_l – присоединенные многочлены Лежандра

$$P_n(x)=\frac{1}{2^n n!}\partial^n_x(x^2-1)^n.$$

B. Вспоминаем вид лестничных операторов

$$\hat{l}_\pm=e^{\pm i\varphi}\left(\pm\partial_\theta+i\operatorname{ctg}\theta\partial_\varphi\right).$$

А также $Y_{l,l}$:

$$Y_{l,l}(\theta,\varphi)=(-1)^l\sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}\frac{1}{2^l l!}\sin^l\theta e^{il\varphi}.$$

Применяем несколько раз $\hat{l}_-$:

$$\hat{l}^l_- Y_{l,l}(\theta,\varphi)=\partial^l_{\cos\theta}\sin^l\theta Y_{l,l}(\theta),\quad\Rightarrow\quad Y_{l,0}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\frac{(-1)^l}{2^l l!}\partial^l_{\cos\theta}\sin^{2l}\theta,$$

что удобно переписать в терминах полиномов Лежандра:

$$P_n(x)=\frac{1}{2^n n!}\partial^n_x(x^2-1)^n,\qquad Y_{l,0}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}P_l(\cos\theta).$$

Также можем пойти назад, через $\hat{l}_+$:

$$\hat{l}_+Y_{l,m}(\theta,\varphi)=\sqrt{l(l+1)-m(m+1)}Y_{l,m+1}(\theta,\varphi),$$

а значит

$$Y_{l,m}(\theta,\varphi)=e^{im\varphi}(-1)^m\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}P_{l,m}(\cos\theta),\qquad 0\leqslant m\leqslant l,$$

с *присоединенными полиномами Лежандра*:

$$P_{l,m}(x)=(1-x^2)^{m/2}\partial^m_x P_l(x).$$

C. Для начала

$$\hat{l}_-\left|l,m\right\rangle=\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\left|l,m-1\right\rangle,\qquad \hat{l}_-\left|l,l\right\rangle=\sqrt{2l}\left|l,l-1\right\rangle.$$

Подсталяя дифференциальное представление $\hat{l}_-$, находим

$$Y_{1,0}=\frac{\hat{l}_-Y_{1,1}}{\sqrt{2}},\quad\Rightarrow\quad Y_{1,0}=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cos\theta.$$

Теперь

$$Y_{2,0}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{5}{4\pi}}P_2(\cos\theta),$$

где P_2 можем найти, как

$$P_2(x)=\frac{3xP_1(x)-P_0(x)}{2}=\frac{3x^2-1}{2},$$

а значит

$$Y_{2,0}=\frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}}(3\cos\theta^2-1)=\frac{1}{8}\sqrt{\frac{5}{\pi}}\left(3\cos(2\theta)+1\right).$$

Теперь с помощью $\hat{l}_+$, находим

$$\hat{l}_+Y_{l,m}(\theta,\varphi)=\sqrt{l(l+1)-m(m+1)}Y_{l,m+1}(\theta,\varphi),\quad\Rightarrow\quad Y_{2,1}=\frac{\hat{l}_+Y_{2,0}}{\sqrt{6}}=-\frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}e^{i\varphi}\sin(2\theta),$$

$$Y_{2,2}=\frac{\hat{l}_+Y_{2,1}}{2}=\frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{\pi}}e^{2i\varphi}\sin^2(\theta).$$

Полиномы Лежандра в атоме водорода

Хоружий Кирилл

Intro. Вспоминаем вид лестничных операторов
$$\hat{l}_\pm = e^{\pm i\varphi}\left(\pm\partial_\theta + i \operatorname{ctg}\theta\partial_\varphi\right).$$
А также $Y_{l,l}$:
$$Y_{l,l}(\theta,\varphi) = (-1)^l\sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}\frac{1}{2^l l!}\sin^l\theta e^{il\varphi}.$$
Применяем несколько раз $\hat{l}_-$:
$$\hat{l}_-^l Y_{l,l}(\theta,\varphi) = \partial^l_{\cos\theta}\sin^l\theta Y_{l,l}(\theta), \quad\Rightarrow\quad Y_{l,0}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\frac{(-1)^l}{2^l l!}\partial^l_{\cos\theta}\sin^{2l}\theta,$$
что удобно переписать в терминах полиномов Лежандра:
$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!}\partial^n_x(x^2-1)^n, \qquad Y_{l,0}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}P_l(\cos\theta).$$
Решение. Для начала
$$\hat{l}_-\left|l,m\right\rangle = \sqrt{(l+m)(l-m+1)}\left|l,m-1\right\rangle, \qquad \hat{l}_-\left|l,l\right\rangle = \sqrt{2l}\left|l,l-1\right\rangle.$$
Подсталяя дифференциальное представление $\hat{l}_-$, находим
$$Y_{1,0} = \frac{\hat{l}_- Y_{1,1}}{\sqrt{2}}, \quad\Rightarrow\quad Y_{1,0} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cos\theta.$$
Теперь
$$Y_{2,0}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{5}{4\pi}}P_2(\cos\theta),$$
где P_2 можем найти, как
$$P_2(x) = \frac{3xP_1(x) - P_0(x)}{2} = \frac{3x^2-1}{2},$$
а значит
$$Y_{2,0} = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}}(3\cos\theta^2 - 1) = \frac{1}{8}\sqrt{\frac{5}{\pi}}\left(3\cos(2\theta)+1\right).$$
Теперь с помощью $\hat{l}_+$, находим
$$\hat{l}_+ Y_{l,m}(\theta,\varphi) = \sqrt{l(l+1)-m(m+1)}Y_{l,m+1}(\theta,\varphi), \quad\Rightarrow\quad \begin{aligned} Y_{2,1} &= \frac{\hat{l}_+ Y_{2,0}}{\sqrt{6}} = -\frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}e^{i\varphi}\sin(2\theta), \\ Y_{2,2} &= \frac{\hat{l}_+ Y_{2,1}}{2} = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{\pi}}e^{2i\varphi}\sin^2(\theta). \end{aligned}$$