

Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Теслик О.М. Чумаченко А.В. Хотяїнцев В.М.
Вільчинський С.Й.

Квантова механіка. Практичні заняття 1 семестр

(Навчальний посібник для фізиків)

Київ-2022

Зміст

1	Оператори у квантовій механіці	9
1.1	Оператори	9
1.1.1	Лінійність операторів	10
1.1.2	Комутатор та антикомутатор операторів	12
1.1.3	Функції від операторів	14
1.2	Оператори: власні числа та вектори, ермітове спряження	22
1.2.1	Власні числа та вектори	22
1.2.2	Ермітове спряження	26
2	Хвилі де Бройля	31
2.1	Хвилі де Бройля. Хвильова функція. Хвильовий пакет	31
2.1.1	Хвилі де Бройля	31
2.1.2	Хвильова функція	32
2.1.3	Часова еволюція хвильового пакету: алгоритм	35
3	Одновимірні потенціали	41
3.1	Нескінченна потенціальна яма	41
3.1.1	Прямокутний потенціал (сходінка)	41
3.1.2	Частинка в нескінченно глибокій потенціальній ямі	43
3.1.3	Потенціальна яма у вигляді δ -функції	47
3.2	Скінченна потенціальна яма	50
3.2.1	Області $x < -a$, $x > a$	51
3.2.2	Область $-a < x < a$	52
3.2.3	Умова зшивки хвильової функції в точках $x = \pm a$	52
3.2.4	Хвильова функція	53
3.2.5	Енергетичний спектр	54
3.3	Періодичний потенціал (гребінка)	57
3.3.1	Оператор трансляції та гамільтоніан: спільний базис	57
3.3.2	Області $-b < x < 0$, $a < x < a + b$	59
3.3.3	Область $0 < x < a$	60
3.3.4	Хвильова функція: умови зшивки	60

3.3.5	Хвильова функція: періодичність	60
3.3.6	Енергетичний спектр	61
3.3.7	Енергетичний спектр: заборонені та дозволені зони .	62
3.3.8	Модель Кроніга-Пенні	63
3.4	Потенціал Морзе	66
3.4.1	Аналіз енергетичного спектру	66
3.4.2	Рівняння Шредінгера	66
3.4.3	Рівняння Шредінгера: асимптотичні розв'язки . . .	67
3.4.4	Рівняння Шредінгера: повний розв'язок	68
3.4.5	Умова обриву ряду	70
3.4.6	Енергетичний спектр	72
3.5	Потенціал Пешль-Теллера	73
3.5.1	Рівняння Шредінгера	73
3.5.2	Енергетичний спектр	75
3.6	Гармонічний осцилятор	76
3.6.1	Рівняння Шредінгера	76
3.6.2	Рівняння Шредінгера: асимптотичний розв'язок . .	76
3.6.3	Рівняння Шредінгера: повний розв'язок	77
3.6.4	Умова обриву ряду	78
3.6.5	Енергетичний спектр	79
3.6.6	Хвильова функція	80
3.7	Гармонічний осцилятор: формалізм операторів народжен- ня та знищення	81
3.7.1	Оператори народження \hat{a}^\dagger та знищення \hat{a} : означення і властивості	81
3.7.2	Гамільтоніан осцилятора через оператори \hat{a}^\dagger, \hat{a} . . .	83
3.7.3	Фізичний зміст операторів \hat{a}^\dagger, \hat{a}	84
3.7.4	Основний стан осцилятора	85
3.7.5	Енергетичний спектр	87
3.7.6	Власні функції гамільтоніана \hat{H}	87
3.8	Обчислення матричних елементів операторів \hat{a}^\dagger, \hat{a} та їх ком- бінацій	90
3.8.1	Оператор числа частинок \hat{N}	90
3.8.2	Дія операторів \hat{a}^\dagger, \hat{a} на стани осцилятора ψ_n	92
3.8.3	Обчислення середніх	93
4	Проходження та відбивання на бар'єрах	97
4.1	Бар'єри	97

5 Момент кількості руху	105
5.1 Власні функції та значення оператора моменту кількості руху	105
5.1.1 Оператор моменту кількості руху та його квадрат	105
5.1.2 \hat{J}_z та оператор квадрата моменту: спільний базис	106
5.1.3 Сходинкові оператори \hat{J}_+ та \hat{J}_-	108
5.1.4 Сходинкові оператори \hat{J}_+ та \hat{J}_- : дія на $ jm\rangle$	109
5.1.5 Сходинкові оператори \hat{J}_+ та \hat{J}_- : фізичний зміст	110
5.1.6 Спектр оператора квадрата моменту кількості руху	111
5.1.7 Власні значення та функції оператора кількості руху	112
5.1.8 Знаходження коефіцієнтів c_{\pm}	113
5.1.9 Додавання моментів	114
5.2 Матричний вигляд оператора моменту кількості руху та його власних функцій у випадку $j = 1/2$	117
5.2.1 Матричний вигляд операторів \hat{J}_{\pm}	118
5.2.2 Матричний вигляд компонент оператора моменту кількості руху	120
5.2.3 Матричний вигляд квадрата оператора кількості руху для $j = 1/2$	123
5.2.4 Явний вигляд елементів базису $\{ \frac{1}{2}, m\rangle\}$	124
5.2.5 Оператори повороту навколо координатних осей для $j = 1/2$	125
5.3 Явний вигляд оператора моменту кількості руху та його власних функцій у випадку $j = 1$	127
5.4 Спін. Матриці Паулі	129
5.4.1 Матриці Паулі	129
5.4.2 Матриці Паулі: комутатор	131
5.4.3 Матриці Паулі: антикомутатор	131
5.4.4 Добуток матриць Паулі	131
5.4.5 Явний вигляд матриць Паулі	132
6 Матриця густини	135
6.1 Матриця густини однокомпонентної системи. Чисті та змішані стани	135
6.2 Матриця густини багатокомпонентної системи	144

Вступ

Розділ 1

Оператори у квантовій механіці

1.1 Оператори

Оператор \hat{A} — це правило виду

$$\hat{A}: \quad \psi \rightarrow \varphi, \quad (1.1)$$

за яким кожний елемент ψ лінійного простору переводиться в інший елемент φ цього ж лінійного простору,

$$\hat{A}\psi = \varphi. \quad (1.2)$$

Приклади операторів:

- оператор похідної ∂_x

$$\partial_x: \quad \psi(x) \rightarrow \psi'(x) = \partial_x \psi(x)$$

- оператор інверсії координат $\hat{\mathcal{I}}$

$$\hat{\mathcal{I}}: \quad \psi(\vec{r}) \rightarrow \psi(-\vec{r})$$

- оператор зсуву координат \hat{T}_a

$$\hat{T}_a: \quad \psi(x) \rightarrow \psi(x+a).$$

Прийнято вважати, що оператор діє лише на те, що знаходиться **справа** від нього. Тобто якщо $\hat{A}\psi = \varphi$, то

$$\chi \hat{A}\psi = \chi \varphi. \quad (1.3)$$

Для послідовності операторів вважається, що першим діє той оператор, що є крайнім справа, потім — наступний за ним, і т.д. Тобто

$$\hat{A}\hat{B}\psi = \hat{A}(\hat{B}\psi) = \hat{A}\varphi = \chi, \quad (1.4)$$

де $\hat{B}\psi = \varphi$.

Як видно з (1.4), добуток операторів також є оператором: шляхом перепозначення $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$ вираз (1.4) зводиться до (1.2).

1.1.1 Лінійність операторів

Оператор \hat{A} є лінійним оператором, якщо одночасно виконуються наступні **умови лінійності оператора**:

$$\hat{A} \sum_i \psi_i = \sum_i \hat{A}\psi_i \quad (1.5)$$

$$\hat{A}c\psi = c\hat{A}\psi, \quad c = \text{const.} \quad (1.6)$$

Задача 1. Довести, що оператор ∂_x є лінійним оператором.

Розв'язок.

Перевіряємо першу умову лінійності (1.5). Нехай $\psi = \sum_i \psi_i$, тоді

$$\partial_x \psi = \psi' = \left(\sum_i \psi_i \right)' = \sum_i \psi_i' = \sum_i \partial_x \psi_i, \quad (1.7)$$

тобто перша умова виконується.

Перевіряємо другу умову лінійності (1.6):

$$\partial_x c\psi = (c\psi)' = c'\psi + c\psi' = 0\psi + c\psi' = c\partial_x \psi, \quad (1.8)$$

тобто друга умова також виконується.

Оператор похідної ∂_x задовольняє обом умовам лінійності, отже він є лінійним оператором.

Задача 2. Перевірити на лінійність оператор зсуву \hat{T}_a .

Розв'язок.

Перевіряємо першу умову лінійності (1.5). Нехай $\psi = \sum_i \psi_i$, тоді

$$\hat{T}_a \psi(x) = \psi(x+a) = \sum_i \psi_i(x+a) = \sum_i \hat{T}_a \psi_i(x), \quad (1.9)$$

тобто перша умова виконується.

Перевіряємо другу умову лінійності (1.6):

$$\hat{T}_a c\psi(x) = c\psi(x+a) = c\hat{T}_a\psi(x), \quad (1.10)$$

тобто друга умова також виконується.

Отже, цей оператор є лінійним.

Задача 3. *Перевірити лінійність оператора піднесення до степеня $\hat{A}_n = ()^n$, $n \geq 0$.*

Розв'язок.

- Випадок $n = 0$.

Перша умова:

$$\begin{aligned} \hat{A}_0\psi &= \psi^0 = \left(\sum_i \psi_i\right)^0 = 1 \\ &\neq \sum_i \hat{A}_0\psi_i = \sum_i \psi_i^0 = \sum_i 1, \end{aligned} \quad (1.11)$$

тобто дана умова не виконується.

Друга умова:

$$\hat{A}_0 c\psi = (c\psi)^0 = 1 \neq c\psi^0 = c, \quad (1.12)$$

тобто друга умова не виконується. Тут неявно враховано наступне перепозначення: $\phi = c\psi$.

Отже, \hat{A}_0 не є лінійним оператором внаслідок порушення умов лінійності.

- Випадок $n = 1$.

Перша умова:

$$\hat{A}_1\psi = \psi^1 = \left(\sum_i \psi_i\right)^1 = \sum_i \psi_i = \sum_i \psi_i^1 = \sum_i \hat{A}_1\psi_i. \quad (1.13)$$

Друга умова:

$$\hat{A}_1 c\psi = (c\psi)^1 = c\psi = c\psi^1 = c\hat{A}_1\psi. \quad (1.14)$$

Обидві умови лінійності задовольняються, отже оператор \hat{A}_1 є лінійним оператором.

Примітка. Перевірку для \hat{A}_1 можна не проводити, якщо врахувати, що $\hat{A}_1 = \hat{I}$ — одиничний оператор, тобто оператор, який завжди переводить елемент ψ в самого себе (нічого не змінює).

- Випадок $n > 1$.

Перша умова. Нехай $\psi = \sum_i \psi_i = \psi_1 + \psi_2$. Тоді

$$\begin{aligned}\hat{A}_{n>1}\psi &= \psi^n = (\psi_1 + \psi_2)^n = \sum_{k=1}^n \binom{n}{k} \psi_1^k \psi_2^{n-k} \\ &\neq \psi_1^n + \psi_2^n = \hat{A}_n\psi_1 + \hat{A}_n\psi_2.\end{aligned}\tag{1.15}$$

Оскільки перша умова (1.5) для оператора $\hat{A}_{n>1}$ не виконується, то він не є лінійним оператором для будь-якого значення $n > 1$.

Отже, оператор піднесення до степеня \hat{A}_n є лінійним оператором лише у випадку $n = 1$.

Задача 4. Перевірити на лінійність оператор інверсії координат $\hat{\mathcal{I}}$.

Задача 5. Перевірити на лінійність оператор зміни масштабу

$$\hat{M}_a: \quad \psi(x) \rightarrow \sqrt{a}\psi(ax).$$

Задача 6. Перевірити на лінійність оператор комплексного спряження

$$\hat{C}: \quad \psi(x) \rightarrow \psi^*(x).$$

1.1.2 Комутатор та антикомутатор операторів

Комутатор операторів \hat{A} та \hat{B} :

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}.\tag{1.16}$$

Якщо комутатор операторів рівний 0, то кажуть, що **оператори комутують**.

В загальному випадку оператори не комутують, тобто результат дії операторів залежить від порядку їх виконання. Наприклад:

- оператори повороту $\hat{R}_{\vec{a}}, \hat{R}_{\vec{b}}$ навколо різних осей \vec{a}, \vec{b}
- оператори зсуву \hat{T}_a та інверсії $\hat{\mathcal{I}}$

$$\begin{aligned}\hat{T}_a\hat{\mathcal{I}}\psi(x) &= \hat{T}_a\psi(-x) = \psi(-x+a) \\ &\neq \hat{\mathcal{I}}\hat{T}_a\psi(x) = \hat{\mathcal{I}}\psi(x+a) = \psi(-x-a).\end{aligned}\tag{1.17}$$

Будь-який оператор завжди комутує сам із собою, тобто $[\hat{A}, \hat{A}] = \hat{A}^2 - \hat{A}^2 = 0$.

Антикомутатор операторів \hat{A} та \hat{B} :

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}. \quad (1.18)$$

Якщо антикомутатор операторів рівний 0, то кажуть, що **оператори антикомутують**.

Задача 7. Довести, що

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}] \quad (1.19)$$

Розв'язок.

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}] &= \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \\ &= -(\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B}) \\ &= -[\hat{B}, \hat{A}]. \end{aligned} \quad (1.20)$$

Задача 8. Показати, що

$$\left[\sum_i \hat{A}_i, \sum_k \hat{B}_k \right] = \sum_{i,k} [\hat{A}_i, \hat{B}_k]. \quad (1.21)$$

Розв'язок.

$$\begin{aligned} \left[\sum_i \hat{A}_i, \sum_k \hat{B}_k \right] &= \sum_i \hat{A}_i \sum_k \hat{B}_k - \sum_k \hat{B}_k \sum_i \hat{A}_i \\ &= \sum_{i,k} \hat{A}_i \hat{B}_k - \sum_{k,i} \hat{B}_k \hat{A}_i \\ &= \sum_{i,k} (\hat{A}_i \hat{B}_k - \hat{B}_k \hat{A}_i) \\ &= \sum_{i,k} [\hat{A}_i, \hat{B}_k]. \end{aligned} \quad (1.22)$$

Задача 9. Знайти антикомутатор операторів \hat{A} та \hat{B} , якщо їхній комутатор дорівнює нулю.

Розв'язок.

$$\begin{aligned}\{\hat{A}, \hat{B}\} &= \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} \\ &= \left| [\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0 \Rightarrow \hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} \right| \\ &= \hat{A}\hat{B} + \hat{A}\hat{B} = 2\hat{A}\hat{B} = 2\hat{B}\hat{A}.\end{aligned}\quad (1.23)$$

Задача 10. Виразити комутатор $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}]$ через комутатори $[\hat{A}, \hat{C}]$ і $[\hat{B}, \hat{C}]$.

Розв'язок.

$$\begin{aligned}[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] &= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} \\ &= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{A}\hat{C}\hat{B} + \hat{A}\hat{C}\hat{B} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} \\ &= \hat{A}(\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{B}) + (\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A})\hat{B} \\ &= \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}.\end{aligned}\quad (1.24)$$

Задача 11. Знайти комутатор операторів \hat{A} та \hat{B} , якщо їхній антикомутатор дорівнює нулю.

Задача 12. Нехай комутатор операторів \hat{A} та \hat{B} рівний їх антикомутатору. Знайти $\hat{B}\hat{A}$. Що можна при цьому сказати про $\hat{A}\hat{B}$?

Задача 13. Знайти $[\hat{A}, \hat{B}^2]$, якщо $[\hat{A}, \hat{B}] = \lambda = \text{const}$.

Задача 14. Довести тотожність Якобі

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0. \quad (1.25)$$

1.1.3 Функції від операторів

Нехай $f(x)$ — функція, для якої визначений ряд Тейлора

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

Тоді **функція від оператора** $f(\hat{A})$ — це оператор, який визначається наступним чином:

$$f(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \hat{A}^n. \quad (1.26)$$

Задача 15. Розкрити дужки в операторному виразі $(\hat{A} - \hat{B})(\hat{A} + \hat{B})$.

Розв'язок.

$$\begin{aligned} (\hat{A} - \hat{B})(\hat{A} + \hat{B}) &= \hat{A}(\hat{A} + \hat{B}) - \hat{B}(\hat{A} + \hat{B}) \\ &= \hat{A}^2 + \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} - \hat{B}^2 \\ &= \hat{A}^2 + [\hat{A}, \hat{B}] - \hat{B}^2. \end{aligned} \quad (1.27)$$

Примітка. Порядок розкриття дужок не суттєвий. Результат не зміниться, якщо розкривати спершу другі дужки.

Задача 16. Розкрити дужки для $(\hat{A} + \hat{B})^2$.

Розв'язок.

$$\begin{aligned} (\hat{A} + \hat{B})^2 &= (\hat{A} + \hat{B})(\hat{A} + \hat{B}) \\ &= \hat{A}(\hat{A} + \hat{B}) + \hat{B}(\hat{A} + \hat{B}) \\ &= \hat{A}^2 + \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} + \hat{B}^2 \\ &= \hat{A}^2 + \{\hat{A}, \hat{B}\} + \hat{B}^2. \end{aligned} \quad (1.28)$$

Примітка. Оскільки про оператори \hat{A} та \hat{B} нічого не відомо, то вони не обов'язково комутують між собою. Саме тому правило розкриття квадрату суми тут не підходить: оператори **не є числами**.

Задача 17. Розкрити дужки для $(x\partial_x)^2$.

Розв'язок.

Оскільки дужки містять оператор похідної, для зручності справа від дужок поставимо символ \bullet , який позначає функцію, на яку діє оператор. Тоді

$$\begin{aligned} (x\partial_x)^2 \bullet &= x\partial_x x\partial_x \bullet \\ &= x\partial_x \bullet + x^2\partial_x^2 \bullet \\ &= (x\partial_x + x^2\partial_x^2) \bullet, \end{aligned} \quad (1.29)$$

де використано, що $\partial_x fg = (fg)' = f'g + fg'$. Опустивши символ \bullet , остаточно отримуємо

$$(x\partial_x)^2 = x^2\partial_x^2 + x\partial_x. \quad (1.30)$$

Задача 18. Розкрити дужки для $(\partial_x + x)^2$.

Розв'язок.

Аналогічно до попередньої задачі,

$$\begin{aligned}
 (\partial_x + x)^2 \bullet &= (\partial_x + x) (\partial_x + x) \bullet \\
 &= (\partial_x + x) (\partial_x \bullet + x \bullet) \\
 &= \partial_x^2 \bullet + x \partial_x \bullet + \partial_x x \bullet + x^2 \bullet \\
 &= \partial_x^2 \bullet + x \partial_x \bullet + \bullet + x \partial_x \bullet + x^2 \bullet \\
 &= \partial_x^2 \bullet + 2x \partial_x \bullet + \bullet + x^2 \bullet \\
 &= (\partial_x^2 + 2x \partial_x + x^2 + 1) \bullet.
 \end{aligned} \tag{1.31}$$

Опустивши символ \bullet , остаточно отримуємо

$$(\partial_x + x)^2 = \partial_x^2 + 2x \partial_x + x^2 + 1. \tag{1.32}$$

Задача 19. Оператори координати $\hat{\vec{r}}$ та імпульсу частинки $\hat{\vec{p}}$ визначаються як

$$\hat{\vec{r}} = \vec{r}, \quad \hat{\vec{p}} = -i\hbar \nabla. \tag{1.33}$$

Обчислити комутатор $[\hat{p}_x, x]$.

Розв'язок.

Аналогічно до попередніх задач, маємо

$$\begin{aligned}
 [\hat{p}_x, x] \bullet &= [-i\hbar \partial_x, x] \bullet \\
 &= -i\hbar \partial_x x \bullet + i\hbar x \partial_x \bullet \\
 &= -i\hbar \bullet - i\hbar x \partial_x \bullet + i\hbar x \partial_x \bullet \\
 &= -i\hbar \bullet,
 \end{aligned} \tag{1.34}$$

звідки остаточно

$$[\hat{p}_x, x] = -i\hbar. \tag{1.35}$$

Задача 20. Оператор моменту імпульсу $\hat{\vec{L}}$ визначається як векторний добуток операторів $\hat{\vec{r}}$ та $\hat{\vec{p}}$

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} = \vec{e}_i \varepsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k, \tag{1.36}$$

де \vec{e}_i — одиничний вектор (орт) вздовж осі Ox_i , ε_{ijk} — символ Леві-Чивіти, а по повторюваним індексам проводиться підсумовування.

Розписавши (1.36) покомпонентно та врахувавши представлення (1.33), отримуємо

$$\begin{aligned}
 \hat{L}_x &= \varepsilon_{1jk} x_j \hat{p}_k = y \hat{p}_z - z \hat{p}_y, \\
 \hat{L}_y &= \varepsilon_{2jk} x_j \hat{p}_k = z \hat{p}_x - x \hat{p}_z, \\
 \hat{L}_z &= \varepsilon_{3jk} x_j \hat{p}_k = x \hat{p}_y - y \hat{p}_x.
 \end{aligned} \tag{1.37}$$

Знайти комутатор $[\hat{L}_i, \hat{x}_s]$.

Розв'язок.

З (1.36), розкривши комутатор згідно (1.16) та врахувавши (1.33), маємо

$$\begin{aligned} [\hat{L}_i, \hat{x}_s] &= [\varepsilon_{ijk} x_j \hat{p}_k, x_s] \\ &= \varepsilon_{ijk} [x_j \hat{p}_k, x_s], \end{aligned} \quad (1.38)$$

де враховано, що ε_{ijk} є сталою відносно операторів координати та імпульсу, а тому його можна винести за межі комутатора.

Використавши (1.24), з (1.38) отримуємо

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ijk} [x_j \hat{p}_k, x_s] &= \varepsilon_{ijk} x_j [\hat{p}_k, x_s] + \varepsilon_{ijk} [x_j, x_s] \hat{p}_k \\ &= \varepsilon_{ijk} x_j (-i\hbar \delta_{ks}) \\ &= -i\hbar \varepsilon_{ijs} x_j, \end{aligned} \quad (1.39)$$

де враховано, що $[\hat{p}_k, x_s] = -i\hbar \delta_{ks}$, $[x_j, x_s] = 0$. Остаточно, врахувавши в (1.39), що $\varepsilon_{ijs} = -\varepsilon_{isj}$, маємо

$$[\hat{L}_i, \hat{x}_s] = i\hbar \varepsilon_{isj} x_j. \quad (1.40)$$

Задача 21. Для операторів

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (m\omega \hat{x} - i\hat{p}) \\ \hat{a} &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (m\omega \hat{x} + i\hat{p}), \end{aligned} \quad (1.41)$$

де m, ω — константи, \hat{x}, \hat{p} — оператори координати та імпульсу в 1-вимірному просторі, знайти комутатор $[\hat{a}^\dagger, \hat{a}]$.

Примітка. Оператори \hat{a}^\dagger та \hat{a} називаються **операторами народження та знищення** частинок.

Розв'язок.

З (1.41) і (1.21)

$$\begin{aligned} [\hat{a}^\dagger, \hat{a}] &= \frac{1}{2\hbar m\omega} [(m\omega \hat{x} - i\hat{p}), (m\omega \hat{x} + i\hat{p})] \\ &= \frac{1}{2\hbar m\omega} (m^2\omega^2 [\hat{x}, \hat{x}] + im\omega [\hat{x}, \hat{p}] - im\omega [\hat{p}, \hat{x}] + [\hat{p}, \hat{p}]) \\ &= \frac{i}{2\hbar} ([\hat{x}, \hat{p}] - [\hat{p}, \hat{x}]) \\ &= -\frac{i}{\hbar} [\hat{p}, \hat{x}] \end{aligned} \quad (1.42)$$

де у 3-му рядку враховано, що $[\hat{x}, \hat{x}] = [\hat{p}, \hat{p}] = 0$, а в 4-му використано (1.19).

Підставивши (1.35) в (1.42), остаточно отримуємо, що

$$[\hat{a}^\dagger, \hat{a}] = -1. \quad (1.43)$$

Задача 22. Знайти комутатор $[f(\hat{A}), \hat{B}]$, якщо $[\hat{A}, \hat{B}] = c = \text{const}$, $f(\hat{A})$ — функція від оператора.

Розв'язок.

Використовуючи (1.26) та (1.21), маємо

$$[f(\hat{A}), \hat{B}] = \sum_n \frac{f^{(n)}(0)}{n!} [\hat{A}^n, \hat{B}]. \quad (1.44)$$

Розглянемо $\hat{A}^n \hat{B}$, врахувавши умову задачі $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = c$:

$$\begin{aligned} \hat{A}^n \hat{B} &= \hat{A}^{n-1} \hat{A} \hat{B} \\ &= \hat{A}^{n-1} (\hat{B} \hat{A} + c) \\ \rightarrow &= \hat{A}^{n-1} \hat{B} \hat{A} + c \hat{A}^{n-1} \\ &= \hat{A}^{n-2} \hat{A} \hat{B} \hat{A} + c \hat{A}^{n-1} \\ &= \hat{A}^{n-2} (\hat{B} \hat{A} + c) \hat{A} + c \hat{A}^{n-1} \\ \rightarrow &= \hat{A}^{n-2} \hat{B} \hat{A}^2 + 2c \hat{A}^{n-1} \\ &= \hat{A}^{n-3} \hat{A} \hat{B} \hat{A}^2 + 2c \hat{A}^{n-1} \\ &= \dots \\ \rightarrow &= \hat{B} \hat{A}^n + nc \hat{A}^{n-1}, \end{aligned} \quad (1.45)$$

де \rightarrow просто вказує на закономірність. Підставляючи (1.45) в (1.44), остаточно отримуємо

$$\begin{aligned} [f(\hat{A}), \hat{B}] &= c \sum_n \frac{f^{(n)}(0)}{n!} n \hat{A}^{n-1} \\ &= c \sum_n \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \partial_{\hat{A}} \hat{A}^n \\ &= c \partial_{\hat{A}} \sum_n \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \hat{A}^n \\ &= c f'(\hat{A}). \end{aligned} \quad (1.46)$$

Задача 23. Нехай $\hat{\sigma}$ — оператор, для якого $\hat{\sigma}^2 = \hat{I}$. Знайти $e^{\alpha\hat{\sigma}}$, де α — довільне число.

Розв'язок.

З (1.26) маємо

$$\begin{aligned}
 e^{\alpha\hat{\sigma}} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} \hat{\sigma}^n \\
 &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\alpha^{2k}}{(2k)!} \hat{\sigma}^{2k} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\alpha^{2k+1}}{(2k+1)!} \hat{\sigma}^{2k+1} \\
 &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\alpha^{2k}}{(2k)!} \hat{I} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\alpha^{2k+1}}{(2k+1)!} \hat{\sigma} \\
 &= \hat{I} \cosh \alpha + \hat{\sigma} \sinh \alpha,
 \end{aligned} \tag{1.47}$$

де у 3-му рядку враховано, що

$$\forall k, \hat{\sigma}^{2k} = (\hat{\sigma}^2)^k = \hat{I}^k = \hat{I}.$$

Задача 24. Нехай $[\hat{A}, \hat{B}] = c = \text{const}$. Довести, що для довільного числа α

$$e^{\alpha(\hat{A}+\hat{B})} = e^{\alpha\hat{A}} e^{\alpha\hat{B}} e^{-c\alpha^2/2}. \tag{1.48}$$

Розв'язок.

Продиференціюємо функцію

$$f(\alpha, \hat{A}, \hat{B}) = e^{\alpha\hat{A}} e^{\alpha\hat{B}}, \quad f|_{\alpha=0} = \hat{I}, \tag{1.49}$$

де \hat{I} — одиничний оператор, по α :

$$\begin{aligned}
 \partial_{\alpha} f &= \partial_{\alpha} e^{\alpha\hat{A}} e^{\alpha\hat{B}} \\
 &= \left(\partial_{\alpha} e^{\alpha\hat{A}} \right) e^{\alpha\hat{B}} + e^{\alpha\hat{A}} \left(\partial_{\alpha} e^{\alpha\hat{B}} \right) \\
 &= e^{\alpha\hat{A}} \hat{A} e^{\alpha\hat{B}} + e^{\alpha\hat{A}} e^{\alpha\hat{B}} \hat{B} \\
 &= \hat{A} f + f \hat{B},
 \end{aligned} \tag{1.50}$$

де у 4-му рядку використано (1.46).

З (1.46) слідує, що

$$[e^{\alpha\hat{A}}, \hat{B}] = \alpha c e^{\alpha\hat{A}}, \tag{1.51}$$

звідки, помноживши (1.51) справа на $e^{\alpha\hat{B}}$, отримуємо

$$[f, \hat{B}] = \alpha c f. \quad (1.52)$$

З (1.50) та (1.52) отримуємо диференціальне рівняння для f :

$$\begin{aligned} \partial_\alpha f &= \hat{A}f + \hat{B}f + \alpha c f \\ &= (\hat{A} + \hat{B} + \alpha c) f. \end{aligned} \quad (1.53)$$

Домноживши (1.53) справа на f^{-1} та проінтегрувавши по α із врахуванням початкової умови (1.49), маємо

$$f = e^{\alpha(\hat{A}+\hat{B})} e^{c\alpha^2/2} = e^{\alpha\hat{A}} e^{\alpha\hat{B}}. \quad (1.54)$$

Помноживши (1.54) на $e^{-c\alpha^2/2}$, отримуємо (1.48).

Примітка. Врахування початкової умови $f|_{\alpha=0} = \hat{I}$, див. (1.49), є необхідним, оскільки в загальному випадку **результатом інтегрування диференціального операторного рівняння (1.53) є функція операторів \hat{A}, \hat{B} , навіть якщо $\alpha = 0$.**

Задача 25. Розкрити дужки для $(\hat{A} - \hat{B})^2$.

Задача 26. Розкрити операторні дужки $(\partial_x + \frac{1}{x})^3$.

Задача 27. Розкрити операторні дужки $(\partial_x \cdot x)^2$.

Задача 28. Показати, що

$$[\hat{p}_i, x_j] = -i\hbar\delta_{ij},$$

де \hat{p}_i — i -та компонента оператора імпульсу, \hat{x}_j — j -та компонента оператора координати, δ_{ij} — символ δ -Кронекера.

Задача 29. Обчислити комутатор $[\hat{p}_i, \hat{p}_j]$.

Задача 30. Обчислити комутатор $[\hat{L}_i, \hat{p}_s]$.

Задача 31. Обчислити комутатор $[\hat{L}_i, \hat{L}_j]$.

Задача 32. Довести, що

$$\hat{S}^{-1} f(\hat{A}) \hat{S} = f(\hat{S}^{-1} \hat{A} \hat{S}), \quad (1.55)$$

де \hat{S}^{-1} — оператор, обернений до \hat{S} , тобто

$$\hat{S}^{-1} \hat{S} = \hat{S} \hat{S}^{-1} = \hat{I}.$$

Задача 33. Довести, що якщо $[\hat{A}, \hat{B}] = c = \text{const}$, то

$$e^{\alpha \hat{A}} \hat{B} e^{-\alpha \hat{A}} = \hat{B} + \alpha c \hat{I}, \quad (1.56)$$

де α — довільне число, \hat{I} — одиничний оператор.

Підказка. Скористатися (1.46).

1.2 Оператори: власні числа та вектори, ермітове спряження

1.2.1 Власні числа та вектори

Власні числа (значення) λ та **власні вектори** (функції) ψ_λ оператора \hat{A} визначаються з рівняння

$$\hat{A}\psi_\lambda = \lambda\psi_\lambda, \quad (1.57)$$

яке називається **задачею на власні функції та власні значення** оператора \hat{A} .

В загальному випадку (1.57) має розв'язки лише для певних значень $\{\lambda_n\}$, сукупність яких називають **спектром оператора**.

Спектр оператора може бути як дискретний (n дискретне), так і неперервний (n неперервне). Числа n називаються **квантовими числами**.

Якщо одному й тому ж власному значенню відповідає більш ніж одна власна функція $\psi_{n_k}, k = \overline{1, K_n}$, то дане власне значення **вироджене**. K_n називають **кратністю виродження** власного значення λ_n . Різні власні значення можуть мати різну кратність виродження.

Задача 34. Знайти власні числа та функції оператора $\hat{A} = \partial_x, -\infty < x < +\infty$.

Розв'язок.

З (1.57) маємо

$$\partial_x \psi_\lambda = \lambda \psi_\lambda, \quad (1.58)$$

тобто диференціальне рівняння 1-го порядку. Оскільки $\partial_x = \frac{d}{dx}$, то, помноживши обидві частини (1.58) на $\frac{dx}{\psi_\lambda}$ та проінтегрувавши, отримаємо

$$\begin{aligned} \frac{d\psi_\lambda}{\psi_\lambda} &= \lambda dx \\ \Rightarrow \int \frac{d\psi_\lambda}{\psi_\lambda} &= \int \lambda dx \\ \Rightarrow \ln \psi_\lambda - \ln \psi_{\lambda|0} &= \lambda (x - x_0), \end{aligned} \quad (1.59)$$

де $\psi_{\lambda|0}, x_0$ — сталі інтегрування.

З (1.59), ввівши позначення $C = \psi_{\lambda|0} e^{-\lambda x_0}$, маємо

$$\psi_\lambda = C e^{\lambda x}. \quad (1.60)$$

Розв'язки (1.60) існують для довільних $\lambda \in \mathbb{C}$, тобто спектр оператора ∂_x є неперервним.

Власні функції, як видно з (1.60), розбігаються для $\lambda \in \mathbb{R}$, якщо $\lambda x \rightarrow +\infty$. Для $\lambda \in i\mathbb{R}$ власні функції є обмеженими.

Задача 35. Розв'язати задачу на власні функції та власні значення для оператора $\hat{A} = i\partial_x$.

Розв'язок.

З (1.57) маємо

$$\begin{aligned} i\partial_x \psi_\lambda &= \lambda \psi_\lambda \\ \Rightarrow \partial_x \psi_\lambda &= -i\lambda \psi_\lambda. \end{aligned} \quad (1.61)$$

Як бачимо, перепозначенням $-i\lambda \rightarrow \lambda$ задача зводиться до попередньої. Отже, можна одразу записати власні функції для оператора $i\partial_x$, замінивши в (1.60) λ на $-i\lambda$:

$$\psi_\lambda = C e^{-i\lambda x}. \quad (1.62)$$

Спектр $\{\lambda\}$ неперервний.

Власні функції ψ_λ розбігаються для $\lambda \in i\mathbb{R}$, якщо $-i\lambda x \rightarrow +\infty$, та є скінченними й періодичними для $\lambda \in \mathbb{R}$.

Задача 36. Знайти власні функції та власні значення оператора $\hat{A} = \partial_x + x$.

Розв'язок.

З (1.57) маємо

$$\begin{aligned} (\partial_x + x) \psi_\lambda &= \lambda \psi_\lambda \\ \Rightarrow \partial_x \psi_\lambda &= (-x + \lambda) \psi_\lambda. \end{aligned} \quad (1.63)$$

Помноживши (1.63) на $\frac{dx}{\psi_\lambda}$ та проінтегрувавши, отримаємо

$$\begin{aligned} \frac{d\psi_\lambda}{\psi_\lambda} &= (-x + \lambda) dx \\ \Rightarrow \int \frac{d\psi_\lambda}{\psi_\lambda} &= \int (-x + \lambda) dx \end{aligned} \quad (1.64)$$

звідки, після перепозначення констант інтегрування,

$$\psi_\lambda = C e^{-\frac{x^2}{2} + \lambda x}. \quad (1.65)$$

Як бачимо, спектр $\{\lambda\}$ оператора $\partial_x + x$ є неперервним, а власні функції — обмеженими для довільних значень $\lambda \in \mathbb{C}$.

Задача 37. Знайти власні функції та власні значення для оператора ∂_φ , де φ — азимутальний кут.

Розв'язок.

З (1.57) маємо

$$\partial_\varphi \psi_\lambda = \lambda \psi_\lambda, \quad (1.66)$$

що з точністю до позначень співпадає з (1.58). Тому, скориставшись (1.62), можна одразу записати, що

$$\psi_\lambda = C e^{\lambda \varphi}. \quad (1.67)$$

Разом з тим, оскільки, згідно з умовою задачі, φ — азимутальний кут, то при повороті на 2π нічого не повинно змінюватися. Тобто

$$\psi_\lambda \Big|_{\varphi+2\pi} = \psi_\lambda \Big|_\varphi \Leftrightarrow C e^{\lambda(\varphi+2\pi)} = C e^{\lambda \varphi}, \quad (1.68)$$

що дає

$$e^{2\pi\lambda} = 1 \Rightarrow \lambda_k = ik, \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (1.69)$$

Таким чином, спектр оператора ∂_φ дискретний.

Підставивши (1.69) в (1.67), отримуємо

$$\psi_k = C e^{ik\varphi}, \quad (1.70)$$

тобто власні функції оператора ∂_φ скінченні та періодичні.

Примітка. Можна сказати, що внаслідок періодичності простору азимутального кута φ у ньому в результаті впливу деструктивної інтерференції виживають лише дискретні моди ψ_k з $\lambda_k \in i\mathbb{N}$. Дана ситуація повністю аналогічна утворенню стоячих хвиль у резонаторі.

Задача 38. Розв'язати задачу на власні функції та власні значення для оператора $f(\hat{A})$, якщо відомі власні функції $\{\psi_\lambda\}_{\hat{A}}$ та спектр $\{\lambda\}_{\hat{A}}$ оператора \hat{A} .

Розв'язок.

Розпишемо дію $f(\hat{A})$ на власну функцію оператора \hat{A} :

$$\begin{aligned}
 f(\hat{A})\psi_\lambda &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \hat{A}^n \psi_\lambda \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \hat{A}^{n-1} \hat{A} \psi_\lambda \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \hat{A}^{n-1} \lambda \psi_\lambda \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \lambda \hat{A}^{n-1} \psi_\lambda \\
 &= \dots \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \lambda^n \psi_\lambda \\
 &= f(\lambda) \psi_\lambda.
 \end{aligned} \tag{1.71}$$

Отже, як видно з (1.71),

$$\begin{aligned}
 \hat{A}: \quad \hat{A}\psi_\lambda &= \lambda\psi_\lambda \\
 f(\hat{A}): \quad f(\hat{A})\psi_\lambda &= f(\lambda)\psi_\lambda,
 \end{aligned} \tag{1.72}$$

тобто власні функції $f(\hat{A})$ збігаються із власними функціями \hat{A} , а спектр переходить у $\{f(\lambda)\}$.

Задача 39. Знайти власні функції та власні значення оператора $i\partial_\varphi$.

Задача 40. Знайти власні функції та спектр оператора $\alpha\hat{p} + \beta\hat{x}$, де α, β — сталі.

Задача 41. Знайти власні функції та власні значення оператора $\partial_x^2 + \frac{2}{x}\partial_x$.

Підказка. Скористатися заміною $\psi_\lambda = \chi_\lambda/x$.

Задача 42. Розв'язати задачу на власні функції та власні значення для оператора $\sin \partial_\varphi$.

Задача 43. Знайти власні функції та спектр оператора $e^{i\alpha\partial_\varphi}, \alpha = \text{const}$.

1.2.2 Ермітове спряження

Ермітово спряжений оператор \hat{A}^\dagger до оператора \hat{A} — це оператор, що визначається як

$$\hat{A}^\dagger: \int \chi^*(q) \hat{A} \psi(q) dq = \int \left[\hat{A}^\dagger \chi(q) \right]^* \psi(q) dq, \quad (1.73)$$

де $\chi(q), \psi(q)$ — довільні функції (вектори) із простору Гільберта.

Оператор \hat{A} називається **ермітовим**, якщо

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}. \quad (1.74)$$

Оператор \hat{A} називається **антиермітовим**, якщо

$$\hat{A}^\dagger = -\hat{A}. \quad (1.75)$$

Примітка. Кожній спостережуваній величині (величині, яку можна виміряти експериментально) у квантовій механіці ставиться у відповідність ермітовий оператор. Кожному ермітовому оператору, визначеному на відповідному просторі Гільберта, відповідає спостережувана величина.

Спектр ермітового оператора завжди дійсний.

Оператор \hat{U} називається **унітарним**, якщо

$$\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}, \quad (1.76)$$

де \hat{U}^{-1} — оператор, обернений до оператора \hat{U} : $\hat{U}^{-1}\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^{-1} = \hat{I}$.

Примітка. Унітарні оператори відповідають поворотам у просторі Гільберта. Унітарні оператори не змінюють норму хвильових функцій (векторів) у гільбертовому просторі. Ситуація повністю аналогічна звичайним операторам повороту (ортогональним матрицям) у евклідовому просторі: як відомо, під час повороту довжина (норма) вектора зберігається.

Задача 44. Показати, що для довільної сталої $\alpha \in \mathbb{C}$

$$\left(\alpha \hat{A} \right)^\dagger = \alpha^* \hat{A}^\dagger. \quad (1.77)$$

Розв'язок.

Згідно (1.73),

$$\begin{aligned} \int \chi^*(q) \alpha \hat{A} \psi(q) dq &= \alpha \int \chi^*(q) \hat{A} \psi(q) dq \\ &= \int \left[\alpha^* \hat{A}^\dagger \chi(q) \right]^* \psi(q) dq. \end{aligned} \quad (1.78)$$

Задача 45. Довести, що

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger. \quad (1.79)$$

Розв'язок.

Послідовно застосовуючи означення (1.73) спершу до оператора \hat{A} , а потім — до оператора \hat{B} , маємо

$$\begin{aligned} \int \chi^*(q) \hat{A}\hat{B}\psi(q) dq &= \int \chi^*(q) \hat{A} [\hat{B}\psi(q)] dq \\ &= \int [\hat{A}^\dagger\chi(q)]^* \hat{B}\psi(q) dq \\ &= \int \left\{ \hat{B}^\dagger [\hat{A}^\dagger\chi(q)] \right\}^* \psi(q) dq \\ &= \int [\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger\chi(q)]^* \psi(q) dq. \end{aligned} \quad (1.80)$$

Задача 46. Визначити, за яких умов добуток двох ермітових операторів \hat{A} та \hat{B} є ермітовим.

Розв'язок.

$$\hat{A}\hat{B} = (\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger = \hat{B}\hat{A} \quad \Rightarrow \quad [\hat{A}, \hat{B}] = 0. \quad (1.81)$$

Задача 47. Показати, що антикомутатор ермітових операторів \hat{A}, \hat{B} є ермітовим.

Розв'язок.

$$\begin{aligned} \{\hat{A}, \hat{B}\}^\dagger &= (\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})^\dagger \\ &= (\hat{A}\hat{B})^\dagger + (\hat{B}\hat{A})^\dagger \\ &= \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger + \hat{A}^\dagger\hat{B}^\dagger \\ &= \hat{B}\hat{A} + \hat{A}\hat{B}. \end{aligned} \quad (1.82)$$

Задача 48. Визначити, чи є ермітовим оператор ∂_x .

Розв'язок.

Згідно означення (1.73)

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \chi^*(x) \partial_x \psi(x) dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} \chi^*(x) d\psi(x) \\ &= \chi^*(x) \psi(x) \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} [\partial_x \chi^*(x)] \psi(x) dx \quad (1.83) \\ &= 0 + \int_{-\infty}^{+\infty} [-\partial_x \chi(x)]^* \psi(x) dx, \end{aligned}$$

де у 2-му рядку здійснено інтегрування за частинами, а в 3-му — враховано обмеженість хвильових функцій із простору Гільберта: $\chi^*(x) \psi(x) \Big|_{-\infty}^{+\infty} = 0$.

Отже, з (1.83)

$$\partial_x^\dagger = -\partial_x \neq \partial_x, \quad (1.84)$$

тобто оператор ∂_x антиермітовий.

Задача 49. Імпульсу \vec{p} у квантовій механіці відповідає оператор

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar \nabla = -i\hbar (\vec{e}_x \partial_x + \vec{e}_y \partial_y + \vec{e}_z \partial_z), \quad (1.85)$$

де $\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$ — орти вздовж осей Ox, Oy, Oz . Довести, що \vec{p} є спостережуваною.

Розв'язок.

Застосувавши (1.77) та (1.84), маємо з (1.85)

$$\hat{\vec{p}}^\dagger = (-i\hbar \nabla)^\dagger = (-i\hbar)^* \nabla^\dagger = i\hbar (-\nabla) = -i\hbar \nabla = \hat{\vec{p}}. \quad (1.86)$$

Отже, оператор імпульсу є ермітовим, а відповідна йому величина — імпульс — спостережуваною.

Задача 50. Довести, що

$$(\hat{A} \hat{B} \dots \hat{V} \hat{Z})^\dagger = \hat{Z}^\dagger \hat{V}^\dagger \dots \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger. \quad (1.87)$$

Задача 51. Довести, що довільний оператор можна представити у вигляді лінійної комбінації ермітових операторів.

Задача 52. Довести, що для ермітових операторів \hat{A}, \hat{B} оператор $\hat{C} = i [\hat{A}, \hat{B}]$ також є ермітовим.

Задача 53. Показати, що для дійсної функції $f(q)$

$$\left[f(\hat{A}) \right]^\dagger = f(\hat{A}^\dagger). \quad (1.88)$$

Задача 54. Визначити, чи є ермітовим оператор ∂_φ .

Задача 55. Знайти, для яких $\alpha \in \mathbb{C}$ оператор $\exp(i\alpha\partial_\varphi)$ є:

1. ермітовим

2. унітарним.

Задача 56. Знайти оператор, ермітово спряжений до оператора $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$.

Задача 57. Знайти, за яких значень n оператор ∂_x^n є ермітовим.

Задача 58. Чи є ермітовим оператор $\sin \partial_x$?

Задача 59. Перевірити, чи є ермітовими оператори народження \hat{a}^\dagger та знищення \hat{a} .

Задача 60. Показати, що оператор $e^{i\hat{a}^\dagger \hat{a}}$ є унітарним.

Розділ 2

Хвилі де Бройля

2.1 Хвилі де Бройля. Хвильова функція. Хвильовий пакет

2.1.1 Хвилі де Бройля

Стану вільної частинки, що поширюється з імпульсом \vec{p} та енергією E , відповідає хвильовий процес (поширення хвилі), який описується (хвильовою) функцією $\psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t)$

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n/2}} \exp\left(i\frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar} - i\frac{Et}{\hbar}\right), \quad (2.1)$$

де n — кількість ступенів вільності частинки (розмірність простору).

Для хвиль де Бройля

$$E = \hbar\omega = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \vec{k}^2, \quad (2.2)$$

де ω — частота хвилі де Бройля, \vec{k} — хвильовий вектор.

Групова швидкість \vec{v} для хвилі де Бройля визначається як

$$\vec{v} = \partial_{\vec{k}}\omega = \frac{\hbar}{m} \vec{k} = \frac{\vec{p}}{m}. \quad (2.3)$$

Як видно з (2.3), групова швидкість залежить від імпульсу частинки та збігається з її швидкістю.

Примітка. Наслідком залежності групової швидкості від хвильового числа k , див. (2.3), є зміна профілю хвильового пакета, який складається з лінійної комбінації хвиль де Бройля з різними імпульсами, з часом.

2.1.2 Хвильова функція

Густина імовірності ρ знаходження частинки у точці \vec{r} у момент часу t визначається квадратом модуля **нормованої** хвильової функції

$$\rho(\vec{r}, t) = \frac{1}{\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r}} |\psi(\vec{r}, t)|^2, \quad (2.4)$$

де нормування вибрано так, щоб повна імовірність $\int \rho(\vec{r}, t) d\vec{r} = 1$.

Густина струму (потік) \vec{j} визначається як

$$\vec{j} = i \frac{\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi). \quad (2.5)$$

Хвильова функція є елементом (вектором) гільбертового простору, для якого координатне представлення (координатний базис) $\{\vec{r}\}$ — лише одне із можливих.

Властивості хвильової функції або ж всього простору Гільберта не залежать від представлення (вибору базису), яке є лише способом опису. Так, можна обрати довільний інший базис (представлення), та перейти до базису абстрактних узагальнених координат $\{\vec{q}\}$: це не вплине на експериментальні результати вимірювань. Єдина вимога — новий базис, як і попередній, повинний бути **повним**, тобто кількість лінійно незалежних елементів базису повинна співпадати з розмірністю простору, в якому задана хвильова функція.

Примітка. Дана ситуація повністю аналогічна опису звичайного вектора у тривимірному просторі: властивості вектора (його довжина, напрямок) не залежать від того, в якому базисі він описаний (декартовому, сферичному, циліндричному, афінному тощо). Повнота базису тут означає, що кількість лінійно незалежних векторів кожного із базисів рівна 3.

Перехід від одного базису (представлення) до іншого **здійснюється за допомогою перетворення Фур'є**.

Зв'язок між координатним $\{\vec{r}\}$ та імпульсним $\{\vec{p}\}$ представленням:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}, t) &= \int_{\Lambda} \phi(\vec{p}, t) \psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) d\Lambda \\ \phi(\vec{p}, t) &= \int_V \psi(\vec{r}, t) \psi_{\vec{p}}^*(\vec{r}, t) dV, \end{aligned} \quad (2.6)$$

де Λ — об'єм у імпульсному просторі.

Незалежність результатів вимірювання від представлення виражається у вигляді **рівності Планшереля**:

$$\int_V |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV = \int_{\Lambda} |\phi(\vec{p}, t)|^2 d\Lambda. \quad (2.7)$$

Нехай є частинка, що описується нормованою хвильовою функцією $\psi(\vec{q}, t)$, та спостережувана, якій відповідає ермітовий оператор \hat{A} . **Результатом вимірювання** спостережуваної в області $\vec{q} \in Q$ буде величина

$$\langle A \rangle = \int_Q \psi^*(\vec{q}, t) \hat{A} \psi(\vec{q}, t) d\vec{q}. \quad (2.8)$$

Іншими словами, $\langle A \rangle$ — це середнє значення оператора \hat{A} на стані $\psi(\vec{q}, t)$ в області $\vec{q} \in Q$.

Задача 61. Знайти загальний розв'язок одновимірного нестационарного рівняння Шредінгера для вільної частинки.

Розв'язок.

Нестационарне рівняння Шредінгера для вільної частинки має вигляд

$$i\hbar \partial_t \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \psi. \quad (2.9)$$

Представимо хвильову функцію $\psi(x, t)$ у вигляді добутку функцій

$$\psi(x, t) = X(x) T(t). \quad (2.10)$$

Після підстановки (2.10) в (2.9) отримаємо

$$\begin{aligned} i\hbar X(x) \partial_t T(t) &= -\frac{\hbar^2}{2m} T(t) \partial_x^2 X(x) \\ \Rightarrow i\hbar \frac{1}{T(t)} \partial_t T(t) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{X(x)} \partial_x^2 X(x) \equiv E = \text{const}, \end{aligned} \quad (2.11)$$

де у першому рядку враховано, що оператори ∂_t, ∂_x діють лише на змінні t та x відповідно. У другому рядку враховано, що ліва та права частини рівняння залежать кожна **лише** від однієї зі змінних (t та x), і тому можуть бути рівними тільки константи (позначеній як E).

Тоді для координатної компоненти $X(x)$ хвильової функції $\psi(x, t)$ з (2.11) маємо

$$\partial_x^2 X(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} X(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad X(x) = X_0 e^{ikx}, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad (2.12)$$

де $X_0 = \text{const}$, а k — хвильове число (що видно з розмірності). Повна хвильова функція $\psi(x \rightarrow \pm\infty, t)$ обмежена (щоб задовольняти умову нормування хвильової функції). Як наслідок, $X(x \rightarrow \pm\infty)$ також обмежена, що можливо лише за умови

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2 \geq 0 \quad \Rightarrow \quad E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \geq 0. \quad (2.13)$$

Для часової компоненти $T(t)$ хвильової функції $\psi(x, t)$ з (2.11) маємо

$$\partial_t T(t) = -i \frac{E}{\hbar} T(t) \quad \Rightarrow \quad T(t) = T_0 e^{-i\omega t}, \quad \omega = \frac{E}{\hbar}, \quad (2.14)$$

де $T_0 = \text{const}$.

Підставивши отримані розв'язки (2.12) та (2.14) в (2.10), отримаємо розв'язок рівняння (2.9) для певного значення k :

$$\psi_k(x, t) = C \exp\left(ikx - i \frac{\hbar}{2m} k^2 t\right), \quad -\infty < k < +\infty, \quad (2.15)$$

де враховано (2.13).

Довільна лінійна комбінація розв'язків (2.15) також буде розв'язком (2.9). Оскільки k пробігає неперевний ряд значень, то **загальний розв'язок** нестационарного рівняння Шредингера для вільної частинки має вигляд

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} C(k) \exp\left(ikx - i \frac{\hbar}{2m} k^2 t\right) dk, \quad (2.16)$$

тобто являє собою суперпозицію хвиль де Бройля (2.1).

Задача 62. В початковий момент часу $t = 0$ вільна частинка описується хвильовою функцією

$$\psi(x, 0) = A \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0 x\right), \quad a > 0, k_0 \in \mathbb{R}. \quad (2.17)$$

Знайти нормуючий коефіцієнт A .

Розв'язок.

Хвильова функція повинна задовольняти умову нормування, яка зводиться до того, що імовірність знайти частинку в усьому просторі рівна 1. Тому нормуючий коефіцієнт A знаходимо з умови, яка зводиться до інтеграла Пуассона

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, 0) \psi(x, 0) dx = 1 \\ \Rightarrow & |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2/a^2} dx = 1 \\ \Rightarrow & |A|^2 a \sqrt{\pi} = 1 \\ \Rightarrow & A = \frac{1}{a^{1/2} \pi^{1/4}}, \end{aligned} \quad (2.18)$$

де загальну фазу покладено рівною 0.

Примітка. Хвильова функція не завжди може бути віднормована таким чином. Приміром, у випадку плоскої хвилі хвильову функцію, у зв'язку із неможливістю нормування на 1, нормують на δ -функцію.

Задача 63. Для хвильової функції (2.17) знайти густину імовірності $\rho(x, 0)$ знаходження частинки в довільній точці простору в момент часу $t = 0$.

Розв'язок.

З (2.4) та (2.18)

$$\begin{aligned}\rho(x, 0) &= |\psi(x, 0)|^2 \\ &= \frac{1}{a\sqrt{\pi}} e^{-x^2/a^2}.\end{aligned}\quad (2.19)$$

Задача 64. Для хвильової функції (2.17) знайти густину струму в момент часу $t = 0$.

Розв'язок.

З (2.5) та (2.18)

$$\begin{aligned}j_x(x, 0) &= i \frac{\hbar}{2m} (\psi \partial_x \psi^* - \psi^* \partial_x \psi) \\ &= i \frac{\hbar}{2m} A^2 e^{-x^2/a^2} \left(-\frac{x}{a^2} - ik_0 + \frac{x}{a^2} - ik_0 \right) \\ &= \frac{\hbar k_0}{m} \frac{1}{a\sqrt{\pi}} e^{-x^2/a^2} \\ &= \frac{\hbar k_0}{m} \rho(x, 0),\end{aligned}\quad (2.20)$$

де в останньому рядку використано (2.19).

2.1.3 Часова еволюція хвильового пакету: алгоритм

Нехай у момент часу $t = 0$ вільна частинка описується (нормованою) хвильовою функцією (хвильовим пакетом) $\psi(x, 0)$.

Алгоритм знаходження $\psi(x, t)$ для довільного моменту часу t :

1. Знайти коефіцієнти Фур'є-розкладу $C(k)$ (амплітуди) початкової функції $\psi(x, 0)$ за плоскими хвилями e^{ikx} згідно формули

$$C(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, 0) e^{-ikx} dx. \quad (2.21)$$

2. Знаючи коефіцієнти $C(k)$, знайти часову залежність хвильового пакета (хвильової функції) $\psi(x, t)$ за формулою (2.16).

Примітка. У випадку вільної частинки потенціал рівний нулю; як результат, імпульс зберігається. Це означає, що для кожного k амплітуда (хвильова функція) $C(k)$ в імпульсному просторі зберігається, а тому не залежить від часу. Проте, оскільки групова швидкість (2.3) для хвилі де Бройля залежить від імпульсу $p = \hbar k$, то весь пакет змінює свій профіль внаслідок інтерференції (див. Примітку підрозділу 1.1).

Задача 65. Знайти коефіцієнти Фур'є-розкладу $C(k)$ для функції (2.17) та визначити ширину хвильового пакету в k -просторі.

Розв'язок.

Підставляючи (2.17) в (2.21), отримаємо

$$\begin{aligned}
 C(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} A \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0 x\right) e^{-ikx} dx \\
 &= \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-\frac{x^2}{2a^2} + i(k_0 - k)x\right] dx \\
 &= \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[\frac{x}{a} - ia(k_0 - k)\right]^2 - \frac{a^2(k_0 - k)^2}{2}\right\} dx \quad (2.22) \\
 &= \sqrt{\frac{a}{\sqrt{\pi}}} \exp\left[-\frac{a^2(k_0 - k)^2}{2}\right],
 \end{aligned}$$

де в останньому рядку використано (2.18).

Примітка. Амплітуда $C(k)$ з (2.22) є хвильовою функцією частинки **в імпульсному представленні**. Функція $\psi(x, 0)$ з (2.17) є хвильовою функцією цієї ж частинки **в координатному представленні**. Обидва представлення, як зазначалося вище, тотожні; вони визначають **лише базис**, який використовується для опису частинки.

Ширина хвильового пакету в k -просторі визначається як інтервал (відстань) $\Delta k = k - k_0$ на половині висоти амплітуди $C(k)$. Тоді з (2.22)

$$\begin{aligned}
 \Delta k = k - k_0: \quad C(k) &= \frac{1}{2} C_{\max}(k) = \frac{1}{2} C(k_0) \\
 \Rightarrow \sqrt{\frac{a}{\sqrt{\pi}}} \exp\left[-\frac{a^2(\Delta k)^2}{2}\right] &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{a}{\sqrt{\pi}}} \\
 \Rightarrow \exp\left[-\frac{a^2(\Delta k)^2}{2}\right] &= \frac{1}{2} \\
 \Rightarrow \Delta k &= \frac{\sqrt{2 \ln 2}}{a} \approx \frac{1}{a}.
 \end{aligned} \quad (2.23)$$

Задача 66. Початковий пакет $\psi(x, 0)$ визначається (2.17). Знайти $\psi(x, t)$ та показати, що густина імовірності $\rho(x, t)$ розпливається.

Розв'язок.

1й п. Алгоритму вже виконано вище, див. (2.22).

2й п. Алгоритму виконаємо, підставивши (2.22) у (2.16):

$$\begin{aligned}
 \psi(x, t) &= \frac{aA}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[-\frac{a^2(k_0 - k)^2}{2} + ikx - i\frac{\hbar k^2}{2m}t \right] dk \\
 &= \frac{aA}{\sqrt{2\pi}} \exp \left(-\frac{a^2 k_0^2}{2} \right) \\
 &\quad \times \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[-\left(\frac{a^2}{2} + i\frac{\hbar t}{2m} \right) k^2 + (a^2 k_0 + ix)k \right] dk \\
 &= \frac{aA}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[\frac{(a^2 k_0 + ix)^2}{2(a^2 + i\frac{\hbar t}{m})} - \frac{a^2 k_0^2}{2} \right] \\
 &\quad \times \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[-\left(\frac{a^2}{2} + i\frac{\hbar t}{2m} \right) \left(k + \frac{a^2 k_0 + ix}{a^2 + i\frac{\hbar t}{m}} \right)^2 \right] dk.
 \end{aligned} \tag{2.24}$$

Оскільки інтеграл в останньому рядку (2.24) — це інтеграл Пуассона, то остаточно

$$\psi(x, t) = \frac{A}{\sqrt{1 + i\frac{\hbar t}{a^2 m}}} \exp \left[-\frac{x^2 - 2ia^2 k_0 x + i\frac{\hbar a^2 k_0^2}{m}t}{2a^2 \left(1 + i\frac{\hbar t}{a^2 m} \right)} \right]. \tag{2.25}$$

Підставивши (2.25) у вираз для густини імовірності (2.4), маємо:

$$\begin{aligned}
 \rho(x, t) &= |\psi(x, t)|^2 \\
 &= \frac{A^2}{\sqrt{1 + \left(\frac{\hbar}{a^2 m} t \right)^2}} \exp \left\{ -\frac{\left(x - \frac{\hbar k_0}{m} t \right)^2}{a^2 \left[1 + \left(\frac{\hbar}{a^2 m} t \right)^2 \right]} \right\}.
 \end{aligned} \tag{2.26}$$

З (2.26) видно, що:

- максимум густини імовірності рухається зі швидкістю $v = \hbar k_0 / m$
- ширина кривої густини імовірності зростає з часом як

$$\sigma(t) = a \sqrt{1 + \left(\frac{\hbar}{a^2 m} t \right)^2}. \tag{2.27}$$

Отже, хвильовий пакет (2.25) розпливається.

Задача 67. Знайти середнє значення $\langle x \rangle$ оператора координати \hat{x} у стані (2.17).

Розв'язок.

З означення середнього від оператора (2.8), скориставшись (2.18), маємо

$$\begin{aligned}\langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, 0) x \psi(x, 0) dx \\ &= \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-x^2/a^2} dx = 0,\end{aligned}\tag{2.28}$$

де використано, що інтеграл по симетричному проміжку від непарної функції завжди рівний 0.

Задача 68. Знайти середньоквадратичне відхилення координати $\langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$ для стану (2.17).

Розв'язок.

Оскільки $\langle x \rangle = 0$, див. (2.28), то

$$\begin{aligned}\langle (\Delta x)^2 \rangle &= \langle x^2 \rangle \\ &= \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-x^2/a^2} dx \\ \left| \alpha = 1/a^2 \right| \Rightarrow &= -\frac{1}{a\sqrt{\pi}} \partial_\alpha \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx \\ &= -\frac{1}{a\sqrt{\pi}} \partial_\alpha \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \\ &= \frac{\alpha^{-3/2}}{2a} \\ &= \frac{a^2}{2}.\end{aligned}\tag{2.29}$$

Задача 69. Знайти середнє значення імпульсу $\langle p \rangle$ для стану (2.17) в імпульсному представленні.

Розв'язок.

Згідно (2.3),

$$\langle p \rangle = \langle \hbar k \rangle = \hbar \langle k \rangle.\tag{2.30}$$

В імпульсному представленні хвильова функція частинки виражається амплітудою $C(k)$, див. (2.22). Тому, скориставшись (2.8), маємо з (2.30)

$$\begin{aligned}\langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} C^*(k) \hbar k C(k) dk \\ &= \frac{a\hbar}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} k e^{-a^2(k-k_0)^2} dk \\ \left| q = a(k - k_0) \right| &\Rightarrow = \frac{\hbar}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{q}{a} + k_0 \right) e^{-q^2} dq \\ &= \hbar k_0,\end{aligned}\tag{2.31}$$

оскільки 1-й доданок у підінтегральній функції дає нуль (інтеграл на симетричному проміжку від непарної функції).

Задача 70. Знайти середньоквадратичне відхилення імпульсу $\langle (\Delta p)^2 \rangle = \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle$ для стану (2.17) в імпульсному представленні.

Розв'язок.

Аналогічно до попередньої задачі, знаходимо, що

$$\begin{aligned}\langle (\Delta p)^2 \rangle &= \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle \\ &= \hbar^2 \langle (k - k_0)^2 \rangle,\end{aligned}\tag{2.32}$$

де у 2-му рядку використано (2.31).

Скориставшись (2.8) та (2.22), маємо з (2.32):

$$\begin{aligned}\langle (\Delta p)^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} C^*(k) \hbar^2 (k - k_0)^2 C(k) dk \\ &= \frac{a\hbar^2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} (k - k_0)^2 e^{-a^2(k-k_0)^2} dk \\ &= -\frac{a\hbar^2}{\sqrt{\pi}} \partial_{a^2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a^2(k-k_0)^2} dk \\ &= -\frac{a\hbar^2}{\sqrt{\pi}} \partial_{a^2} \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{a^2}} \\ &= \frac{\hbar^2}{2a^2}.\end{aligned}\tag{2.33}$$

Задача 71. Показати, що для хвильового пакету (2.25) густина потоку j_x рівна

$$j_x = \rho(x, t) \frac{\hbar k_0}{m} \frac{1 + \frac{\hbar x t}{a^4 m k_0}}{1 + \left(\frac{\hbar}{a^2 m} t \right)^2}.\tag{2.34}$$

Задача 72. Довести, що середнє значення імпульсу $\langle p \rangle$ для стану (2.17) у координатному представленні співпадає з (2.31).

Підказка. В координатному представленні оператор імпульсу має вигляд $\hat{p}_x = -i\hbar\partial_x$.

Задача 73. Показати, що середньоквадратичне відхилення імпульсу $\langle (\Delta p)^2 \rangle$ у координатному представленні співпадає з (2.33).

Задача 74. Переконатися, що співвідношення невизначеностей для координати та імпульсу у стані (2.25) має вигляд

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4}. \quad (2.35)$$

Задача 75. Знайти хвильову функцію $\phi(x, t)$ та співвідношення невизначеностей для координати та імпульсу, якщо початкова хвильова функція має вигляд

$$\phi(x, 0) = \sqrt{\frac{p_0}{\pi\hbar}} \sin \frac{xp_0}{\hbar}, \quad 0 \leq x \leq \frac{2\pi\hbar}{p_0}. \quad (2.36)$$

Задача 76. Показати, що хвильовий пакет з часом не розпливається, якщо початкова хвильова функція має вигляд

$$\chi(x, 0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp \left[-\frac{m\omega}{2\hbar} (x - x_0)^2 \right]. \quad (2.37)$$

Розділ 3

Одновимірні потенціали

3.1 Нескінченна потенціальна яма

Нехай частинка перебуває в одновимірному потенціалі $V(x)$, який не залежить від часу. Гамільтоніан тоді також не залежить від часу, і частинка описується **стаціонарним рівнянням Шредінгера**

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + \hat{V}(x) \right] \psi(x) = E \psi(x), \quad (3.1)$$

де m — маса частинки, $\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ — оператор кінетичної енергії, \hat{V} — оператор потенціальної енергії, E — енергія частинки.

3.1.1 Прямокутний потенціал (сходинка)

Задача 77. Дослідити поведінку хвильової функції $\psi(x)$ для різних значень потенціалу $V = \text{const}$ відносно енергії частинки E .

Розв'язок.

Оскільки потенціал V не залежить від часу, то з (3.1)

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V \right) \psi(x) = E \psi(x) \\ \Rightarrow & \frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \psi(x) + (E - V) \psi(x) = 0 \\ \Rightarrow & \partial_x^2 \psi(x) + k^2 \psi(x) = 0, \end{aligned} \quad (3.2)$$

де k — хвильове число частинки

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) = \text{const} \in \mathbb{R}. \quad (3.3)$$

Розв'язком диференціального рівняння (3.2) є

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (3.4)$$

де $A, B = \text{const} \in \mathbb{C}$ — довільні сталі.

Примітка. Оскільки $\psi(x)$ — хвильова функція, то на значення сталих A, B необхідно також накласти додаткові умови, що впливають із властивостей хвильової функції (наприклад, умову нормування).

Між E та V можуть існувати наступні два співвідношення:

- $E > V$. У цьому випадку, як слідує з (3.4), $k \in \mathbb{R}$, тобто імпульс частинки $p = \hbar k$ дійсний. Хвильова функція (3.4) при цьому являє собою лінійну комбінацію плоских хвиль та є обмеженою.

Примітка. Потенціал V можна покласти рівним нулю, якщо переозначити енергію частинки як $E' = E - V$.

- $E < V$. У цьому випадку, як слідує з (3.4), $k \in i\mathbb{R}$, тобто імпульс частинки $p = \hbar k$ стає уявним. При цьому, як слідує з (3.4), хвильова функція має вигляд

$$\psi(x) = Ae^{-qx} + Be^{qx}, \quad k = iq, \quad q \in \mathbb{R}. \quad (3.5)$$

Як бачимо, $\psi(x)$ є лінійною комбінацією експонент. Врахування скінченності хвильової функції вимагає такого вибору сталих A, B , за яких вираз (3.5) не розбігатиметься (залишатиметься скінченим). Якщо не забезпечити умову скінченності $\psi(x)$, то тоді існуватиме така область значень $x \in X$, для якої густина імовірності

$$\rho(x) = |\psi(x)|^2 \rightarrow +\infty, \quad x \in X. \quad (3.6)$$

Це означає, що імовірність знаходження частинки в області $x \in X$ прямуватиме до нескінченності, що фізично некоректно (імовірність не може перевищувати 1).

Вибір скінченних розв'язків означає, що хвильова функція частинки в області потенціалу експоненціально спадає, якщо її власна енергія менша за значення потенціалу V .

Примітка. Даний випадок є неможливим з точки зору класичної фізики: класична частинка **не може** потрапити в дану область. Разом з тим, як бачимо, хвильова функція, що описує квантову частинку, за таких умов не рівна нулю — хоча й спадає експоненціально при заглибленні в дану область. Це означає, що квантова

частинка, на відміну від класичної, **може проникати** в область, де потенціал є більшим за її енергію. Даний ефект є причиною такого квантового явища, як **тунелювання крізь потенціальний бар'єр**.

Задача 78. Показати, що для потенціалу $V = \text{const}$ хвильова функція $\psi(x) \rightarrow 0$, якщо $V \rightarrow \infty$.

Розв'язок.

Оскільки $V \rightarrow \infty$, то для довільного значення енергії частинки E завжди виконуватиметься $E < V$. В такому випадку хвильова функція описується виразом (3.5); скориставшись (3.3), маємо

$$\psi(x) = A \exp \left[-x \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V - E)} \right] + B \exp \left[x \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V - E)} \right], \quad (3.7)$$

звідки

$$\psi(x) \Big|_{V \rightarrow \infty} = A e^{-x\infty} + B e^{x\infty}. \quad (3.8)$$

Оскільки знак координати x залежить лише від вибору напрямку осі Ox , то без втрати загальності виберемо $x\infty > 0$.

Тоді умова скінченності хвильової функції — див. коментар до (3.6) — вимагає покласти $B = 0$, що дає

$$\psi(x) \Big|_{V \rightarrow \infty} = A e^{-|x\infty|} \rightarrow 0, \quad (3.9)$$

тобто в області нескінченного значення потенціалу V хвильова функція рівна нулю.

Примітка. Рівність хвильової функції нулю в якійсь області означає, що імовірність знайти в цій області частинку також рівна нулю.

3.1.2 Частинка в нескінченно глибокій потенціальній ямі

Задача 79. Для потенціалу

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x \leq 0 \\ 0, & 0 < x < l \\ \infty, & x \geq l \end{cases} \quad (3.10)$$

знайти хвильову функцію частинки з масою m .

Розв'язок.

Потенціал $V(x)$ розбиває вісь Ox на 3 області, у кожній з яких приймає певне значення, див. Рис. 3.1. Тому знайдемо розв'язки рівняння Шредінгера (3.1) окремо в кожній області.

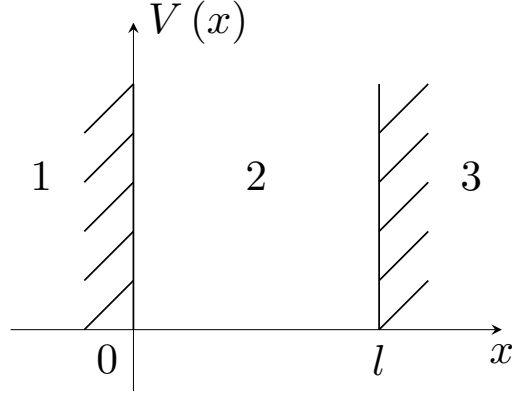


Рис. 3.1: Нескінченна потенціальна яма

Поза ямою (області 1 та 3) потенціал нескінченний. Тому, скориставшись (3.9), можна одразу записати

$$\begin{aligned} x \leq 0: \quad \psi_1(x) &= 0 \\ x \geq l: \quad \psi_3(x) &= 0 \end{aligned} \quad (3.11)$$

Всередині ями, де $0 < x < l$, маємо рівняння Шредінгера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \psi_2(x) = E \psi_2(x). \quad (3.12)$$

Тут потенціал рівний нулю (що є стала величина). Як результат, розв'язок задачі співпадає із розв'язком Задачі 77, в якому слід покласти $V = 0$.

Оскільки енергія частинки $E > V = 0$, то з (3.4), (3.3) маємо

$$0 < x < l: \quad \psi_2(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \quad (3.13)$$

З умови неперервності хвильової функції

$$\begin{aligned} \psi_1(0) &= \psi_2(0) \\ \psi_2(l) &= \psi_3(l), \end{aligned} \quad (3.14)$$

та з (3.13) отримуємо систему рівнянь для коефіцієнтів A, B

$$\begin{cases} A + B = 0 \\ A e^{ikl} + B e^{-ikl} = 0 \end{cases} \quad (3.15)$$

звідки, скориставшись тим, що $\sin \varphi = \frac{e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}}{2i}$, та ввівши нову константу $C = 2iA$, отримаємо

$$\psi_2(x) = \psi_n(x) = C \sin(k_n x), \quad (3.16)$$

де

$$k_n = \frac{\pi n}{l}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.17)$$

Сталу C можна знайти з умови нормування хвильової функції:

$$\begin{aligned} \int_0^l \psi_n^2(x) dx &= C^2 \int_0^l \sin^2\left(\frac{\pi n}{l}x\right) dx \\ &= C^2 \frac{l}{2} \\ &= 1 \\ &\Downarrow \\ C &= \sqrt{\frac{2}{l}}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Підставивши (3.18) та (3.17) в (3.16), отримуємо **нормовану хвильову функцію частинки в нескінченній ямі**

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{\pi n x}{l}. \quad (3.19)$$

Задача 80. Знайти енергію E частинки маси m , що перебуває в потенціалі (3.10).

Розв'язок.

З (3.13) та (3.17) отримуємо **енергетичний спектр** частинки:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ml^2} n^2, \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.20)$$

Як бачимо, він є **дискретним**, тобто енергія частинки може приймати лише певні фіксовані значення, які залежать від розміру потенціальної ями l .

Примітка.

- На відміну від квантової, енергія класичної частинки в потенціалі (3.10) пробігає неперервну множину значень, тобто **дискретність енергетичного спектру** — це суто квантовий ефект.

- Дана ситуація повністю аналогічна хвилі в резонаторі. Всередині резонатора, як відомо, внаслідок деструктивної інтерференції можуть існувати лише певні моди з фіксованими значеннями хвильового числа і частоти (стоячі хвилі).
- Слід звернути увагу, що ситуація, незважаючи на рівність нулю потенціалу, **відрізняється від випадку вільної частинки**. Відмінність полягає в тому, що у випадку ями частинка рухається в обмеженій області, в той час як вільна — ні.

Задача 81. Для хвильової функції частинки у нескінченній потенціальній ямі знайти функцію розподілу за імпульсами.

Розв'язок.

(3.19) описує частинку в нескінченній ямі в координатному представленні. Для розв'язку задачі необхідно здійснити перехід від координатного до імпульсного представлення хвильової функції:

$$\begin{aligned}
 \phi_n(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n(x) e^{-ipx/\hbar} dx \\
 (3.19) \quad \Rightarrow \quad &= \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar l}} \int_0^l \sin\left(\frac{\pi n x}{l}\right) e^{-ipx/\hbar} dx \\
 &= \sqrt{\frac{l}{\pi\hbar}} \frac{\pi\hbar^2 n}{(pl)^2 - (\pi n\hbar)^2} [(-1)^n e^{-ipl/\hbar} - 1].
 \end{aligned} \tag{3.21}$$

З (3.21) отримуємо функцію розподілу за імпульсами:

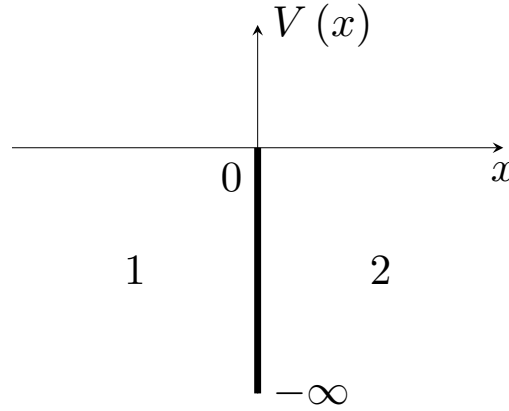
$$\begin{aligned}
 \rho_n(p) &= |\phi_n(p)|^2 \\
 &= \frac{2\pi\hbar^3 l n^2}{[(pl)^2 - (\pi n\hbar)^2]^2} \left[1 - (-1)^n \cos \frac{pl}{\hbar} \right].
 \end{aligned} \tag{3.22}$$

Задача 82. Знайти відстань ΔE_n між сусідніми енергетичними рівнями для частинки в потенціалі (3.10). Дослідити поведінку $\frac{\Delta E_n}{E_n}$ для великих n .

Задача 83. Знайти середнє значення координати $\langle x \rangle$ та середньоквадратичне відхилення координати $\langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$ для частинки в нескінченно глибокій потенціальній ямі.

Задача 84. Знайти середнє значення імпульсу $\langle p \rangle$ та середньоквадратичне відхилення імпульсу $\langle (\Delta p)^2 \rangle = \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle$ для частинки в нескінченно глибокій потенціальній ямі.

Підказка. Скористатися (3.22).

Рис. 3.2: δ -потенціал

Задача 85. Знайти хвильову функцію та спектр частинки з масою m у нескінченно глибокій тривимірній потенціальній ямі з потенціалом

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} \infty, & x \leq 0, \quad y \leq 0, \quad z \leq 0 \\ 0, & 0 < x < a, \quad 0 < y < b, \quad 0 < z < c. \\ \infty, & x \geq a, \quad y \geq b, \quad z \geq c \end{cases} \quad (3.23)$$

3.1.3 Потенціальна яма у вигляді δ -функції

Задача 86. Знайти розв'язок рівняння Шредінгера для частинки маси m , що знаходиться у δ -потенціалі

$$V(x) = -\alpha\delta(x), \quad (3.24)$$

де $\delta(x)$ — δ -функція Дірака.

Розв'язок.

Для потенціалу (3.24), див. Рис. 3.2, всюди, окрім точки $x = 0$, рівняння Шредінгера має вигляд

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi(x) = E\psi(x), \quad (3.25)$$

розв'язки якого

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad E > 0 \quad (3.26)$$

$$\psi(x) = Ce^{kx} + De^{-kx}, \quad k = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}, \quad E < 0. \quad (3.27)$$

Розв'язки (3.26) є плоскими хвилями, що описують вільну частинку, див. (3.4).

Розглянемо випадок $E < 0$, коли розв'язки рівняння (3.25) визначаються (3.27). У цьому випадку умова скінченності хвильової функції вимагає, щоб показник експоненти завжди був від'ємний, що дає для областей 1 та 2

$$\begin{aligned} x < 0: \quad \psi_1(x) &= Ce^{kx} \\ x > 0: \quad \psi_2(x) &= De^{-kx}. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Умова неперервності хвильової функції для (3.28) дає

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \quad \Rightarrow \quad C = D. \quad (3.29)$$

Записавши рівняння Шредінгера в ε -околі точки $x = 0$, де $\varepsilon \rightarrow 0$, отримаємо

$$\begin{aligned} \partial_x^2 \psi(x) + \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \delta(x) \psi(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) &= 0 \\ \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \bullet dx \Big| \Rightarrow \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \left[\partial_x^2 \psi(x) + \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \delta(x) \psi(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) \right] dx &= 0 \\ \psi'(\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon) + \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(0) + \frac{2mE}{\hbar^2} 2\varepsilon \psi(x \in [-\varepsilon, \varepsilon]) &= 0 \\ \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \Big| \Rightarrow \psi'_2(0) - \psi'_1(0) + \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(0) &= 0, \end{aligned} \quad (3.30)$$

тобто похідна хвильової функції в точці $x = 0$ має стрибок. Підставивши у 4-й рядок (3.30) вирази (3.28) і (3.29), отримаємо

$$\begin{aligned} -kC - kC &= -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} C \\ k &= \frac{m\alpha}{\hbar^2}, \end{aligned} \quad (3.31)$$

що разом з (3.27) дає **спектр енергій**

$$E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}. \quad (3.32)$$

Як видно з (3.32), спектр для частинки у δ -потенціалі складається **лише з одного рівня** — незважаючи на те, що потенціал нескінченно глибокий.

З умови нормування та (3.28)

$$\begin{aligned}
 1 &= \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^0 |\psi_1(x)|^2 dx + \int_0^{+\infty} |\psi_2(x)|^2 dx \\
 (3.29) \quad \Rightarrow \quad &= C^2 \int_{-\infty}^0 e^{2kx} dx + C^2 \int_0^{+\infty} e^{-2kx} dx \\
 &= \frac{C^2}{k} \\
 \Rightarrow \quad &C = \sqrt{k} = \sqrt{\frac{m\alpha}{\hbar^2}},
 \end{aligned} \tag{3.33}$$

де в останньому рядку використано (3.31).

Підставивши (3.33) в (3.28) та використавши (3.29) і (3.31), отримаємо **хвильову функцію** для δ -потенціалу

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{m\alpha}{\hbar^2}} e^{-\alpha m|x|/\hbar^2}, \quad E < 0. \tag{3.34}$$

Задача 87. Для хвильової функції (3.34) знайти середні значення операторів кінетичної та потенціальної енергій.

3.2 Скінченна потенціальна яма

Знайти енергетичний спектр та хвильові функції для частинки маси m у потенціалі, див. Рис. 3.3,

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| > a \\ -V_0, & |x| < a. \end{cases} \quad (3.35)$$

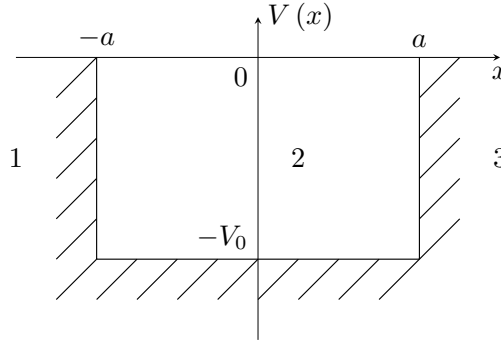


Рис. 3.3: Потенціальна яма скінченної глибини

Запишемо рівняння Шредінгера для потенціалу (3.35):

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi(x) &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x) \\ \Rightarrow \quad \partial_x^2 \psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \psi(x) &= 0, \end{aligned} \quad (3.36)$$

де E — енергія частинки.

Для енергій частинки $E > 0$ спектр частинки буде неперервний, а частинка описуватиметься плоскими хвилями.

Для енергій $E < 0$ дозволений діапазон енергій частинки лежить у межах $-V_0 < E < 0$, який і буде розглядатися в подальшому.

Задача 88. Показати, що власні функції гамільтоніана \hat{H} для скінченної прямокутної потенціальної ями можна розбити на парні та непарні.

Розв'язок.

Парні ψ_s та непарні ψ_a функції є власними функціями оператора інверсії $\hat{\mathcal{I}}$, тобто:

$$\begin{aligned} \mathcal{I}\psi_s(x) &= \psi_s(-x) = \psi_s(x) \\ \mathcal{I}\psi_a(x) &= \psi_a(-x) = -\psi_a(x). \end{aligned} \quad (3.37)$$

Розглянемо дію комутатора $[\hat{\mathcal{I}}, \hat{H}]$ на довільну функцію $\zeta(x)$:

$$\begin{aligned}
 (1.16) \Rightarrow [\hat{\mathcal{I}}, \hat{H}] \zeta(x) &= (\hat{\mathcal{I}}\hat{H} - \hat{H}\hat{\mathcal{I}}) \zeta(x) \\
 &= \hat{H}(-x) \zeta(-x) - \hat{H}(x) \zeta(-x) \\
 &= \hat{H}(-x) \hat{\mathcal{I}} \zeta(x) - \hat{H}(x) \hat{\mathcal{I}} \zeta(x) \\
 &= [\hat{H}(-x) - \hat{H}(x)] \hat{\mathcal{I}} \zeta(x) \quad (3.38) \\
 \left\{ \begin{array}{l} (\partial_{-x})^2 = \partial_x^2, \\ (3.35), \\ (3.36) \end{array} \right. &\Rightarrow [\hat{H}(x) - \hat{H}(x)] \hat{\mathcal{I}} \zeta(x) \\
 &= 0.
 \end{aligned}$$

Таким чином, як випливає з (3.38), дія комутатора $[\hat{\mathcal{I}}, \hat{H}]$ на довільну функцію $\zeta(x)$ дорівнює нулю. Це можливо тоді і тільки тоді, коли **оператори $\hat{\mathcal{I}}$ та \hat{H} комутують**, тобто

$$[\hat{\mathcal{I}}, \hat{H}] = 0. \quad (3.39)$$

Як відомо, якщо ермітові оператори комутують, то для них можна побудувати спільний повний базис, елементи якого будуть власними функціями цих операторів. Отже, згідно (3.39), власні функції гамільтоніана \hat{H} (3.36) можна обрати такими, щоб вони були й власними функціями оператора інверсії $\hat{\mathcal{I}}$ – тобто розбивалися на парні та непарні функції (3.37).

3.2.1 Області $x < -a$, $x > a$

В областях 1 та 3, див. Рис. 3.3, з (3.36) маємо рівняння

$$\partial_x^2 \psi(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = 0, \quad (3.40)$$

розв'язки якого було знайдено раніше:

$$\begin{aligned}
 x < -a: \quad \psi_1(x) &= Ae^{kx} + Be^{-kx} \\
 x > a: \quad \psi_3(x) &= Ce^{kx} + De^{-kx}, \quad k = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} \in \mathbb{R}. \quad (3.41)
 \end{aligned}$$

Хвильова функція повинна бути скінченною в усій області визначення $-\infty < x < +\infty$ (умова скінченності хвильової функції). Для (3.41) це

означає, що коефіцієнти при розбіжних компонентах повинні бути рівними нулю, тобто

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= Ae^{kx} \\ \psi_3(x) &= De^{-kx}.\end{aligned}\tag{3.42}$$

3.2.2 Область $-a < x < a$

Для даної області $V = -V_0$, що після підстановки в (3.36) дає рівняння

$$\partial_x^2 \psi_2(x) + \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2} \psi_2(x) = 0,\tag{3.43}$$

розв'язок якого

$$\psi_2 = F \cos \mu x + G \sin \mu x, \quad \mu = \sqrt{\frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2}} \in \mathbb{R}.\tag{3.44}$$

Тут було використано те, що $|E| = -E > 0$, оскільки, як було сказано вище, розглядаються від'ємні значення енергії.

Примітка. Отриманий розв'язок є скінченним в усій області $-a < x < a$, тому тут зануляти коефіцієнти **не можна**.

3.2.3 Умова зшивки хвильової функції в точках $x = \pm a$

Хвильова функція та її похідна повинні бути неперервними в усій області визначення. Це означає, що на границі потенціальної ями

$$\begin{cases} \psi_1(-a) = \psi_2(-a) \\ \psi_1'(-a) = \psi_2'(-a) \\ \psi_2(a) = \psi_3(a) \\ \psi_2'(a) = \psi_3'(a) \end{cases}\tag{3.45}$$

Підставляючи (3.42) та (3.44) у (3.45), отримаємо наступну систему рівнянь

$$\begin{cases} Ae^{-ka} - F \cos \mu a + G \sin \mu a = 0 \\ Ake^{-ka} - F\mu \sin \mu a - G\mu \cos \mu a = 0 \\ De^{-ka} - F \cos \mu a - G \sin \mu a = 0 \\ Dke^{-ka} - F\mu \sin \mu a + G\mu \cos \mu a = 0 \end{cases},\tag{3.46}$$

яка є однорідною СЛАР 4-го порядку відносно невідомих коефіцієнтів A, F, G, D .

Оскільки СЛАР (3.46) однорідна, то умовою існування нетривіального розв'язку для неї є рівність нулю її визначника

$$\begin{vmatrix} e^{-ka} & -\cos \mu a & \sin \mu a & 0 \\ ke^{-ka} & -\mu \sin \mu a & -\mu \cos \mu a & 0 \\ 0 & -\cos \mu a & -\sin \mu a & e^{-ka} \\ 0 & -\mu \sin \mu a & \mu \cos \mu a & ke^{-ka} \end{vmatrix} = 0. \quad (3.47)$$

Розв'язуючи (3.47), отримуємо рівняння

$$k^2 - \mu^2 + 2k\mu \cot 2\mu a = 0. \quad (3.48)$$

з коренями

$$\begin{aligned} k_a &= -\mu \cot \mu a \\ k_s &= \mu \tan \mu a. \end{aligned} \quad (3.49)$$

3.2.4 Хвильова функція

Підстановка k_a з (3.49) у СЛАР (3.46) дає

$$\begin{cases} D_a &= -A_a \\ F_a &= 0 \\ G_a &= -A_a \frac{e^{-k_a a}}{\sin \mu a} \end{cases}, \quad (3.50)$$

що разом з (3.42) та (3.44) дає непарну хвильову функцію $\psi_a(x) = -\psi_a(-x)$:

$$\psi_a(x) = \begin{cases} \psi_{1a}(x) = A_a e^{k_a x}, & x < -a \\ \psi_{2a}(x) = -A_a \frac{e^{-k_a a}}{\sin \mu a} \sin \mu x, & -a < x < a \\ \psi_{3a}(x) = -A_a e^{-k_a x}, & x > a. \end{cases} \quad (3.51)$$

Коефіцієнт A_a знаходиться з умови нормування

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_a|^2 dx \\ &= \int_{-\infty}^{-a} |\psi_{1a}|^2 dx + \int_{-a}^a |\psi_{2a}|^2 dx + \int_a^{+\infty} |\psi_{3a}|^2 dx, \end{aligned}$$

що дає

$$A_a = \frac{e^{k_a a}}{\sqrt{(a + 1/k_a) [1 + (k_a/\mu)^2]}}. \quad (3.52)$$

Підстановка k_s з (3.49) у СЛАР (3.46) дає

$$\begin{cases} D_s &= A_s \\ F_s &= A_s \frac{e^{-k_s a}}{\cos \mu a}, \\ G_s &= 0 \end{cases} \quad (3.53)$$

що разом з (3.42) та (3.44) дає парну хвильову функцію $\psi_s(x) = \psi_s(-x)$:

$$\psi_s(x) = \begin{cases} \psi_{1s}(x) = A_s e^{k_s x}, & x < -a \\ \psi_{2s}(x) = A_s \frac{e^{-k_s a}}{\cos \mu a} \cos \mu x, & -a < x < a \\ \psi_{3s}(x) = A_s e^{-k_s x}, & x > a \end{cases} \quad (3.54)$$

Коефіцієнт A_s для (3.54) знаходиться з умови нормування

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_s|^2 dx \\ &= \int_{-\infty}^{-a} |\psi_{1s}|^2 dx + \int_{-a}^a |\psi_{2s}|^2 dx + \int_a^{+\infty} |\psi_{3s}|^2 dx, \end{aligned}$$

що дає

$$A_s = \frac{e^{k_s a}}{\sqrt{(a + 1/k_s) [1 + (k_s/\mu)^2]}}. \quad (3.55)$$

Як можна бачити, (3.55) співпадає з (3.52) при заміні $k_a \rightarrow k_s$.

3.2.5 Енергетичний спектр

З (3.41) та (3.44)

$$k^2 + \mu^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} = \text{const}. \quad (3.56)$$

З (3.49) та (3.56) знаходимо рівняння для енергетичного спектру E парних і непарних станів відповідно:

$$\begin{aligned} \psi_a: \quad \mu_a a &= \pm \sqrt{\frac{2ma^2 V_0}{\hbar^2}} \sin \mu_a a \\ \psi_s: \quad \mu_s a &= \pm \sqrt{\frac{2ma^2 V_0}{\hbar^2}} \cos \mu_s a, \end{aligned} \quad (3.57)$$

де енергія E виражається через μ , див. (3.44):

$$\mu = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 + E)} \quad \Rightarrow \quad E = \frac{\hbar^2}{2m} \mu^2 - V_0 \quad (3.58)$$

Розглянемо $\lim_{V_0 \rightarrow 0} \mu a$. Оскільки, як слідує з (3.58),

$$\mu a \Big|_{V_0 \rightarrow 0} \rightarrow 0 \quad E \Big|_{V_0 \rightarrow 0} \rightarrow 0 \quad (3.59)$$

(другий вираз — це просто наслідок розглядуваного випадку $-V_0 < E < 0$), то з (3.57) та (3.58)

$$\begin{aligned} \psi_a \Big|_{V_0 \rightarrow 0} : \quad \mu_a a &= \pm \sqrt{\frac{2ma^2 V_0}{\hbar^2}} \mu_a a \\ \psi_s \Big|_{V_0 \rightarrow 0} : \quad \mu_s a &= \pm \sqrt{\frac{2ma^2 V_0}{\hbar^2}} \left(1 - \frac{\mu_s^2 a^2}{2} \right), \end{aligned} \quad (3.60)$$

що дає

$$\begin{aligned} \psi_a \Big|_{V_0 \rightarrow 0} : \quad 1 &= \pm \sqrt{\frac{2ma^2 V_0}{\hbar^2}} \\ \psi_s \Big|_{V_0 \rightarrow 0} : \quad \mu_s a &= \pm \sqrt{\frac{\hbar^2}{2ma^2 V_0}} \left(\sqrt{1 + \frac{4ma^2 V_0}{\hbar^2}} - 1 \right), \end{aligned} \quad (3.61)$$

тобто непарні стани існують не для всіх можливих значень глибини ями V_0 (верхній рядок не завжди сумісний), а парні стани завжди мають принаймні один зв'язаний стан (нижній рядок сумісний).

Задача 89. Знайти рівні енергії для частинки маси m в потенціалі

$$V(x) = \begin{cases} V_1, & x < -a \\ 0, & -a < x < a \\ V_2, & x > a \end{cases}, \quad V_2 > V_1 \quad (3.62)$$

в області $0 < E < V_1$, див. Рис. 3.4.

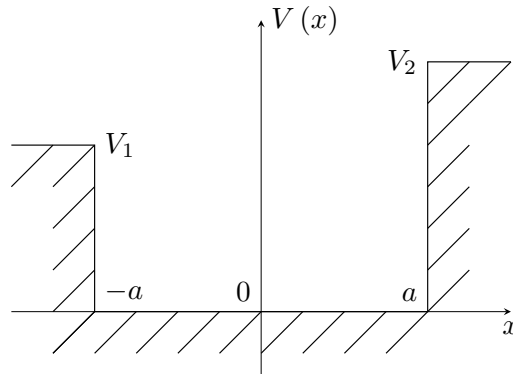


Рис. 3.4: Потенціальна яма зі сходиною

Задача 90. Знайти рівні енергії зв'язаних станів частинки маси m у тривимірному потенціалі скінченної глибини. Дослідити умови існування хоча б одного зв'язаного стану.

3.3 Періодичний потенціал (гребінка)

Знайти значення енергії, які може приймати частинка маси m у періодичному прямокутному потенціалі $V(x)$ з періодом $l = a + b$, див. Рис. 3.5

$$V(x) = \begin{cases} 0, & nl < x < nl + a \\ V_0, & nl + a < x < (n+1)l \end{cases}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (3.63)$$

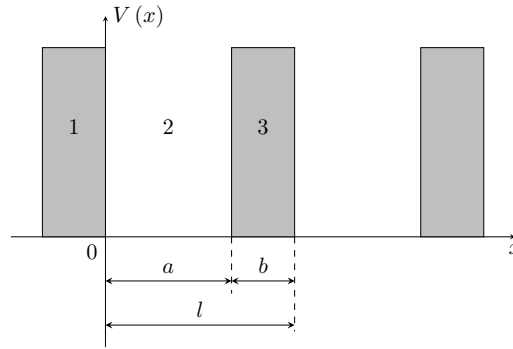


Рис. 3.5: Періодичний потенціал (гребінка)

Для значень $E > V_0$ частинка описуватиметься плоскими хвилями. В подальшому розглядаємо області $E < V_0$.

3.3.1 Оператор трансляції та гамільтоніан: спільний базис

Оскільки потенціальна енергія $V(x)$ з (3.63) не залежить від часу, то гамільтоніан системи також не залежить від часу. Відповідно, записуємо **стаціонарне рівняння Шредінгера** для потенціалу (3.63):

$$\hat{H}(x) \psi(x) = E \psi(x) \quad \hat{H}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + \hat{V}(x), \quad (3.64)$$

де $\hat{H}(x)$ — оператор Гамільтона для частинки у потенціалі $\hat{V}(x)$, E — енергія частинки (власне значення гамільтоніану).

Подіємо зліва оператором трансляції \hat{T}_l на (3.64):

$$\begin{aligned}
 & \hat{T}_l \hat{H}(x) \psi(x) = \hat{T}_l E \psi(x) \\
 \Rightarrow & \hat{T}_l \hat{H}(x) \psi(x) = E \hat{T}_l \psi(x) \\
 \Rightarrow & \hat{H}(x+l) \psi(x+l) = E \psi(x+l) \\
 \left| \hat{H}(x+l) = \hat{H}(x) \right| \Rightarrow & \hat{H}(x) \psi(x+l) = E \psi(x+l) \\
 \Rightarrow & \hat{H}(x) \hat{T}_l \psi(x) = E \hat{T}_l \psi(x),
 \end{aligned} \tag{3.65}$$

де у 4-му рядку ми скористалися періодичністю потенціалу $V(x+l) = V(x)$, див. (3.63), та тим, що $\partial_{x+l} = \partial_x$.

Порівнявши 2-й та останній рядки (3.65), отримуємо, що оператор \hat{H} комутує з оператором трансляції \hat{T}_l :

$$[\hat{H}(x), \hat{T}_l] = 0. \tag{3.66}$$

Примітка. Даний висновок (про комутативність операторів) можливо зробити тому, що (3.65) виконується **для всіх** функцій, що задовольняють рівняння (3.64) — а, отже, утворюють **повний базис**. Якби (3.65) задовольнялася не для всіх функцій повного базису, то (3.66) не виконувалося б.

Як відомо, для комутуючих операторів завжди можна побудувати спільний базис, тобто базис функцій, які будуть власними функціями обох цих операторів. Для випадку (3.66) це означає, що власні функції $\psi(x)$ оператора $\hat{H}(x)$ можна вибрати так, щоб вони були також і власними функціями оператора \hat{T}_l :

$$\begin{cases} \hat{T}_l \psi(x) = \tau(l) \psi(x) \\ \hat{H}(x) \psi(x) = E \psi(x) \end{cases}, \tag{3.67}$$

де $\tau(l)$ — власне значення оператора трансляції \hat{T}_l .

Очевидно, що трансляція n разів підряд на відстань l — це те ж саме, що трансляція на відстань nl . Це можна записати як

$$(\hat{T}_l)^n = \hat{T}_{nl}. \tag{3.68}$$

Тоді

$$\begin{aligned}
 (3.68) \Rightarrow & (\hat{T}_l)^n \psi(x) = \hat{T}_{nl} \psi(x) \\
 (3.67) \Rightarrow & [\tau(l)]^n \psi(x) = \tau(nl) \psi(x) \\
 \Rightarrow & [\tau(l)]^n = \tau(nl) \\
 \Leftrightarrow & \tau(l) = e^{ql}, \quad q \in \mathbb{C},
 \end{aligned} \tag{3.69}$$

тобто $\tau(l)$ — це степенева функція від l .

Запишемо $\psi(x + nl)$

$$\begin{aligned} \psi(x + nl) &= \left(\hat{T}_l\right)^n \psi(x) \\ (3.67) \Rightarrow &= [\tau(l)]^n \psi(x) \\ (3.69) \Rightarrow &= e^{nql} \psi(x), \end{aligned} \quad (3.70)$$

яка, очевидно, також є власною функцією оператора \hat{T}_l .

Внаслідок (3.67), $\psi(x + nl)$ є також власною функцією оператора Гамільтона $\hat{H}(x)$ — тобто розв'язком відповідного рівняння Шредінгера. Останнє означає, що $\psi(x + nl)$ є хвильовою функцією, і тому повинна задовольняти умові обмеженості хвильової функції, що можливо лише, якщо множник e^{nql} за модулем рівний 1:

$$|e^{nql}| = 1 \Rightarrow q = ik, \quad k \in \mathbb{R}, \quad (3.71)$$

див. (3.70).

Примітка. Величина k називається **квазіімпульсом** та має розмірність $1/x$. Вираз $k \in \mathbb{R}$ у (3.71) означає, що величина k може приймати довільне значення на множині дійсних чисел \mathbb{R} .

Остаточно з (3.70) та (3.71)

$$\psi(x + l) = e^{ikl} \psi(x), \quad k \in \mathbb{R}. \quad (3.72)$$

3.3.2 Області $-b < x < 0$, $a < x < a + b$

В областях $-b < x < 0$ та $a < x < a + b$, як слідує з (3.63), $V = V_0$. Відповідно, рівняння Шредінгера (3.64) має вигляд

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V_0\right) \psi_{1(3)}(x) = E \psi_{1(3)}(x), \quad (3.73)$$

загальний розв'язок якого

$$\begin{aligned} -b < x < 0: \quad \psi_1(x) &= A e^{\lambda x} + B e^{-\lambda x} \\ a < x < a + b: \quad \psi_3(x) &= C e^{\lambda x} + D e^{-\lambda x}, \end{aligned} \quad (3.74)$$

де

$$\lambda = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)}, \quad \lambda \in \mathbb{R}. \quad (3.75)$$

3.3.3 Область $0 < x < a$

В області $0 < x < a$, як слідує з (3.63), $V = 0$. Відповідно, рівняння Шредінгера (3.64) має вигляд

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi_2(x) = E\psi_2(x), \quad (3.76)$$

загальний розв'язок якого

$$\psi_2(x) = Fe^{i\chi x} + Ge^{-i\chi x}, \quad (3.77)$$

де

$$\chi = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}, \quad \chi \in \mathbb{R}. \quad (3.78)$$

3.3.4 Хвильова функція: умови зшивки

Хвильова функція та її похідна повинні бути неперервними в точках переходу між областями $x = 0$ та $x = a$, тобто

$$\begin{cases} \psi_1(0) = \psi_2(0) \\ \psi_1'(0) = \psi_2'(0) \\ \psi_2(a) = \psi_3(a) \\ \psi_2'(a) = \psi_3'(a) \end{cases} \quad (3.79)$$

Підставляючи знайдені розв'язки (3.74) і (3.77) в (3.79), отримуємо

$$\begin{cases} A + B - F - G = 0 \\ A\lambda - B\lambda - iF\chi + iG\chi = 0 \\ Ce^{\lambda a} + De^{-\lambda a} - Fe^{i\chi a} - Ge^{-i\chi a} = 0 \\ C\lambda e^{\lambda a} - D\lambda e^{-\lambda a} - iF\chi e^{i\chi a} + iG\chi e^{-i\chi a} = 0 \end{cases} \quad (3.80)$$

— систему рівнянь, які пов'язують між собою невідомі коефіцієнти A, B, C, D, F, G .

Очевидно, що 4 рівнянь у (3.80) недостатньо для однозначного визначення усіх 6 невідомих A, B, C, D, F, G : потрібно ще 2 рівняння.

3.3.5 Хвильова функція: періодичність

Додаткові 2 рівняння можна взяти з умови періодичності хвильової функції.

Нехай $\psi(x)$ — повна хвильова функція в усіх областях. Іншими словами,

$$\psi(x) \equiv \psi_j(x), \quad (3.81)$$

якщо x лежить в області $j, j = \overline{1, 3}$, див. Рис. 3.5.

Розглянемо випадок, коли x знаходиться в області $j = 1$. Тоді $x + l$ лежить в області $j = 3$. Тобто

$$\begin{aligned} \left| x: j = 1, (3.81) \right| &\Rightarrow \psi_3(x + l) \equiv \psi(x + l) \\ (3.72) &\Rightarrow = e^{ikl} \psi(x) \\ (3.81) &\Rightarrow \equiv e^{ikl} \psi_1(x) \\ (3.74) &\Rightarrow Ce^{\lambda(x+l)} + De^{-\lambda(x+l)} = e^{ikl} (Ae^{\lambda x} + Be^{-\lambda x}) \\ &\Rightarrow (Ce^{\lambda l} - Ae^{ikl}) e^{\lambda x} = (Be^{ikl} - De^{-\lambda l}) e^{-\lambda x}. \end{aligned} \quad (3.82)$$

Співвідношення (3.82) виконується для довільних $-\infty < x < +\infty$. Це можливо лише за умови, якщо в останньому рядку (3.82) вирази у круглих дужках одночасно рівні 0, що дає

$$\begin{cases} C = Ae^{(-\lambda+ik)l} \\ D = Be^{(\lambda+ik)l} \end{cases}. \quad (3.83)$$

3.3.6 Енергетичний спектр

Підставляючи (3.83) у (3.80), отримуємо СЛАР 4-го порядку

$$\begin{cases} A + B - F - G = 0 \\ A\lambda - B\lambda - iF\chi + iG\chi = 0 \\ Ae^{-\lambda b+ikl} + Be^{\lambda b+ikl} - Fe^{i\chi a} - Ge^{-i\chi a} = 0 \\ A\lambda e^{-\lambda b+ikl} - B\lambda e^{\lambda b+ikl} - iF\chi e^{i\chi a} + iG\chi e^{-i\chi a} = 0 \end{cases}, \quad (3.84)$$

де використано, що $l = a + b$.

Оскільки СЛАР однорідна, то умовою існування нетривіального розв'язку є рівність її визначника нулю, тобто

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ \lambda & -\lambda & -i\chi & i\chi \\ e^{-\lambda b+ikl} & e^{\lambda b+ikl} & -e^{i\chi a} & -e^{-i\chi a} \\ \lambda e^{-\lambda b+ikl} & -\lambda e^{\lambda b+ikl} & -i\chi e^{i\chi a} & i\chi e^{-i\chi a} \end{vmatrix} = 0. \quad (3.85)$$

Розкривши визначник у (3.85), отримуємо **енергетичний спектр у періодичному прямокутному потенціалі**

$$\cosh(\lambda b) \cos(\chi a) + \frac{\lambda^2 - \chi^2}{2\lambda\chi} \sinh(\lambda b) \sin(\chi a) = \cos kl. \quad (3.86)$$

де λ та χ виражаються через енергію E — див. (3.75) та (3.78).

3.3.7 Енергетичний спектр: заборонені та дозволені зони

Права частина (3.86) — обмежена функція, оскільки

$$|\cos kl| \leq 1, \quad (3.87)$$

де k — довільне дійсне число, див. (3.71).

Проте ліва частина (3.86) за модулем може перевищувати 1. Це еквівалентно тому, що існують такі області значень енергії E_- , за яких (3.86) не є сумісним. Ці області є неперервними та утворюють **заборонені зони**.

Коли ж ліва частина (3.86) за модулем менша 1, то дане рівняння для енергетичного спектру є сумісним, тобто визначає допустимі значення енергії E .

Оскільки квазіімпульс k пробігає неперервний ряд значень, то відповідні значення енергії E утворюють неперервні області дозволених значень, т.зв. **дозволені зони**.

Примітка. У попередніх задачах дозволені енергетичні рівні утворювали дискретну структуру. Зонна структура (існування неперервних дозволених енергетичних зон) обумовлена саме періодичною структурою потенціалу, який визначає неперервні області значень для квазіімпульсу, див. (3.71). Якби квазіімпульс k приймав лише дискретні значення, то рівняння (3.86) було б сумісне (мало б розв'язки) лише для певних значень енергії E . Розглянута задача пояснює існування дозволених зон у періодичних структурах (наприклад, у кристалах).

Як можна бачити, (3.86) стає несумісним в околі точок $\chi_- a = \pi q$, де q — довільне ціле число. За таких умов (3.86) переходить у

$$\chi_- a = \pi q \quad \Rightarrow \quad (-1)^q \cosh \lambda_- b = \cos kl, \quad (3.88)$$

де ліва частина за модулем більша або рівна 1, а права — завжди менша або рівна 1. З (3.78) тоді отримуємо, що заборонена зона лежить в околі точки

$$E_- = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2 q^2}{a^2}. \quad (3.89)$$

Примітка. (3.88) сумісне лише для точки, див. (3.75),

$$\lambda_- = 0 \quad \Rightarrow \quad E_- = V_0, \quad (3.90)$$

який відповідає рівняння Шредінгера $\partial_x^2 \psi(x) = 0$. Розв'язки такого рівняння $\psi(x) = C_0 + C_1 x$, які є несумісними з умовою обмеженості хвильової функції. Отже, стан, що задовольняє (3.90), не існує.

3.3.8 Модель Кроніга-Пенні

Задача 91. Розглянути поведінку (3.86) за наступних умов:

$$\lim_{\substack{V_0 \rightarrow \infty \\ b \rightarrow 0}} : \quad \frac{2mV_0b}{\hbar^2} = c = \text{const} \neq 0 \quad (3.91)$$

(модель **Кроніга-Пенні**).

Розв'язок.

- Застосуємо наближення (3.91) до λb :

$$\begin{aligned} (3.75) \Rightarrow \lim_{\substack{V_0 \rightarrow \infty \\ b \rightarrow 0}} \lambda b &= \lim_{\substack{V_0 \rightarrow \infty \\ b \rightarrow 0}} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)} b \\ &= \lim_{\substack{V_0 \rightarrow \infty \\ b \rightarrow 0}} \sqrt{\frac{2mV_0b}{\hbar^2} - \frac{2mEb}{\hbar^2}} \sqrt{b} \\ (3.91) \Rightarrow &= \lim_{b \rightarrow 0} \sqrt{c - 0} \sqrt{b} \\ &= 0. \end{aligned} \quad (3.92)$$

- Застосуємо наближення (3.91) до $\lambda^2 b$:

$$\begin{aligned} (3.75) \Rightarrow \lim_{\substack{V_0 \rightarrow \infty \\ b \rightarrow 0}} \lambda^2 b &= \lim_{\substack{V_0 \rightarrow \infty \\ b \rightarrow 0}} \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 b - Eb) \\ (3.91) \Rightarrow &= c. \end{aligned} \quad (3.93)$$

- Застосуємо наближення (3.91) до $\cosh \lambda b$:

$$\begin{aligned} (3.92) \Rightarrow \lim_{\substack{V_0 \rightarrow \infty \\ b \rightarrow 0}} \cosh \lambda b &= \lim_{\zeta \rightarrow 0} \cosh \zeta \\ &= \lim_{\zeta \rightarrow 0} \frac{e^\zeta + e^{-\zeta}}{2} \\ &= \frac{1 + 1}{2} \\ &= 1. \end{aligned} \quad (3.94)$$

- Застосуємо наближення (3.91) до $\frac{\sinh \lambda b}{\lambda b}$:

$$\begin{aligned}
 (3.92) \Rightarrow \lim_{\substack{V_0 \rightarrow \infty \\ b \rightarrow 0}} \frac{\sinh \lambda b}{\lambda b} &= \lim_{\zeta \rightarrow 0} \frac{\sinh \zeta}{\zeta} \\
 &= \lim_{\zeta \rightarrow 0} \frac{e^\zeta - e^{-\zeta}}{2\zeta} \\
 &= \lim_{\zeta \rightarrow 0} \frac{1 + \zeta - (1 - \zeta)}{2\zeta} \\
 &= 1.
 \end{aligned} \tag{3.95}$$

Застосуємо наближення (3.91) до (3.86):

$$\begin{aligned}
 (3.86) \Rightarrow \lim_{\substack{V_0 \rightarrow \infty \\ b \rightarrow 0}} &\left[\cosh(\lambda b) \cos(\chi a) + \frac{\lambda^2 - \chi^2}{2\lambda\chi} \sinh(\lambda b) \sin(\chi a) \right] \\
 (3.94) \Rightarrow &= \lim_{\substack{V_0 \rightarrow \infty \\ b \rightarrow 0}} \left[\cos(\chi a) + \frac{\lambda^2 - \chi^2}{2\lambda\chi} \sinh(\lambda b) \sin(\chi a) \right] \\
 &= \cos(\chi a) + \lim_{\substack{V_0 \rightarrow \infty \\ b \rightarrow 0}} \frac{\lambda^2 b - b\chi^2}{2\chi} \frac{\sinh(\lambda b)}{\lambda b} \sin(\chi a) \\
 (3.95) \Rightarrow &= \cos(\chi a) + \lim_{\substack{V_0 \rightarrow \infty \\ b \rightarrow 0}} \frac{\lambda^2 b - b\chi^2}{2\chi} \sin(\chi a) \\
 (3.91), (3.93) \Rightarrow &= \cos(\chi a) + \frac{c}{2\chi} \sin(\chi a) \\
 (3.86) \Rightarrow &= \cos kl.
 \end{aligned} \tag{3.96}$$

В наближенні (3.91)

$$\lim_{b \rightarrow 0} l = \lim_{b \rightarrow 0} (a + b) = a, \tag{3.97}$$

що разом з (3.96) дає **енергетичний спектр в наближенні Кроніга-Пенні**

$$\cos \chi l + \frac{c}{2\chi} \sin \chi l = \cos kl. \tag{3.98}$$

Позначивши $\tan \alpha = \frac{c}{2\chi}$, перепишемо (3.98) як

$$\frac{\cos(\chi l - \alpha)}{\cos \alpha} = \cos kl. \tag{3.99}$$

З (3.99) видно, що межі дозволених зон енергії визначаються умовою

$$\cos(\chi l - \alpha) = \pm \cos \alpha \quad \Rightarrow \quad \chi l = \begin{cases} \pi q \\ \pi q + 2\alpha \end{cases}, \quad q = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \tag{3.100}$$

Переписавши χ через E за допомогою (3.78), видно, що верхній рядок (3.100) співпадає з (3.89).

3.4 Потенціал Морзе

Задача 92. Знайти енергетичний спектр частинки маси m у **потенціалі Морзе**

$$V(x) = V_0 (e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x}). \quad (3.101)$$

Розв'язок.

3.4.1 Аналіз енергетичного спектру

Як видно з (3.101),

$$\begin{aligned} V(x \rightarrow -\infty) &\rightarrow +\infty \\ V(x \rightarrow +\infty) &\rightarrow -0. \end{aligned} \quad (3.102)$$

Знайдемо мінімум потенціалу $V(x)$:

$$\begin{aligned} \partial_x V(x) &= 0 \\ (3.101) \Rightarrow 2\alpha V_0 (e^{-\alpha x} - e^{-2\alpha x}) &= 0 \\ \Leftrightarrow x &= 0 \\ (3.101) \Rightarrow \min V(x) &= -V_0. \end{aligned} \quad (3.103)$$

Отже, потенціал $V(x)$ при русі вздовж осі Ox зліва направо спадає з $+\infty$ до $\min V = -V_0$, а потім починає зростати до -0 .

Відповідно, **спектр енергій $E > 0$ буде неперервний.**

Примітка. Дискретний спектр може існувати лише в області, обмежений потенціалом з обох боків — аналогічно до того, як дискретний спектр стоячих хвиль може існувати лише у замкненому резонаторі.

В даному випадку **дискретні рівні енергії можливі лише там, де $E < V \Leftrightarrow E < 0$** , які й шукатимемо далі.

3.4.2 Рівняння Шредінгера

Оскільки потенціал $V(x)$, див. (3.101), не залежить від часу, то маємо стаціонарне рівняння Шредінгера:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V_0 (e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x}) \right] \psi(x) = E \psi(x). \quad (3.104)$$

Зробимо заміну змінних

$$y = e^{-\alpha x}, \quad 0 < y < +\infty. \quad (3.105)$$

Тоді ∂_x виражається як

$$\begin{aligned}
 \partial_x &= (\partial_x y) \partial_y \\
 (3.105) \Rightarrow &= (e^{-\alpha x})' \partial_y \\
 &= -\alpha e^{-\alpha x} \partial_y \\
 (3.105) \Rightarrow &= -\alpha y \partial_y,
 \end{aligned} \tag{3.106}$$

а ∂_x^2 — як

$$\begin{aligned}
 (3.106) \Rightarrow \partial_x^2 &= (-\alpha y \partial_y)^2 \\
 &= \alpha^2 (y \partial_y)^2 \\
 &= \alpha^2 y \partial_y y \partial_y \\
 &= \alpha^2 (y^2 \partial_y^2 + y \partial_y).
 \end{aligned} \tag{3.107}$$

Підставивши (3.105) та (3.107) в (3.104), отримаємо рівняння Шредінгера в наступному вигляді:

$$[y^2 \partial_y^2 + y \partial_y - \beta^2 (y^2 - 2y) + \varepsilon] \psi(y) = 0, \tag{3.108}$$

де введено позначення

$$\begin{aligned}
 \beta^2 &= \frac{2m}{\hbar^2} \frac{V_0}{\alpha^2}, \quad \beta^2 > 0 \\
 \varepsilon &= \frac{2m}{\hbar^2} \frac{E}{\alpha^2}, \quad \varepsilon < 0.
 \end{aligned} \tag{3.109}$$

3.4.3 Рівняння Шредінгера: асимптотичні розв'язки

Коли $y \rightarrow +\infty$, у рівнянні Шредінгера (3.108) можна відкинути члени, пропорційні y та const . В результаті воно набуває асимптотичного вигляду

$$\partial_y^2 \psi_\infty - \beta^2 \psi_\infty = 0, \tag{3.110}$$

розв'язок якого, як відомо,

$$\psi_\infty = A e^{-\beta y} + B e^{\beta y}. \tag{3.111}$$

Внаслідок умови скінченності хвильової функції необхідно покласти $B = 0$, що дає для (3.111)

$$\psi_\infty = A e^{-\beta y}. \tag{3.112}$$

Примітка. Даний підхід застосовний, оскільки при цьому не змінюється порядок диференціального рівняння (залишається 2-га похідна). Окрім того, з математичної т.з., (3.110) застосовне за умови скінченності першої похідної.

Коли $y \rightarrow 0$, представимо асимптотичний розв'язок у вигляді

$$\psi_0 = y^k, \quad (3.113)$$

що після підстановки в (3.108) дає

$$k(k-1)y^k + ky^k - \beta^2 y^{k+2} + 2\beta^2 y^{k+1} + \varepsilon y^k = 0. \quad (3.114)$$

Оскільки $y \rightarrow 0$, то в (3.114) можна знехтувати членами, пропорційними y^{k+1} та y^{k+2} . Тоді з (3.114)

$$\begin{aligned} & [k(k-1) + k + \varepsilon] y^k = 0 \\ \Rightarrow & (k^2 + \varepsilon) y^k = 0 \\ \Leftrightarrow & k^2 + \varepsilon = 0 \\ \Rightarrow & k = \pm\sqrt{-\varepsilon}, \quad k \in \mathbb{R}, \end{aligned} \quad (3.115)$$

де в останньому рядку враховано, що $\varepsilon < 0$, див. (3.109).

З (3.115) випливає, що ψ_0 має 2 розв'язки: $\psi_0 = y^{\pm\sqrt{-\varepsilon}}$. Розв'язок $\psi_0 = y^{-\sqrt{-\varepsilon}}$ розбігається при $y \rightarrow 0$, отже його слід відкинути (умова скінченності хвильової функції). В результаті, асимптотичний розв'язок в околі $y \rightarrow 0$ матиме вигляд (3.113), де

$$k = \sqrt{-\varepsilon}, \quad k > 0. \quad (3.116)$$

3.4.4 Рівняння Шредінгера: повний розв'язок

Представимо повний розв'язок ψ рівняння (3.108) у вигляді

$$\begin{aligned} \psi &= \psi_0 \psi_\infty \phi(y) \\ (3.113), (3.112) \Rightarrow &= y^k e^{-\beta y} \phi(y), \end{aligned} \quad (3.117)$$

де ψ_0 визначається виразом (3.113), а ψ_∞ — виразом (3.112). Константу інтегрування A з (3.112) можна опустити, переозначивши функцію $\phi(y)$.

Функція ϕ повинна бути такою функцією, щоб асимптотична поведінка ψ не змінювалася, тобто

$$\phi(y) : \quad \psi \rightarrow \begin{cases} \psi_0, & y \rightarrow 0 \\ \psi_\infty, & y \rightarrow +\infty \end{cases}. \quad (3.118)$$

Знайдемо $\partial_y \psi = \psi'$:

$$\begin{aligned} (3.117) \Rightarrow \quad \psi' &= (y^k e^{-\beta y} \phi)' \\ &= y^k e^{-\beta y} \phi' + k y^{k-1} e^{-\beta y} \phi - \beta y^k e^{-\beta y} \phi \\ (3.117) \Rightarrow &= y^k e^{-\beta y} \phi' + \left(\frac{k}{y} - \beta \right) \psi. \end{aligned} \quad (3.119)$$

Друга похідна $\partial_y^2 \psi = \psi''$:

$$\begin{aligned}
 (3.119) \Rightarrow \psi'' &= \left[y^k e^{-\beta y} \phi' + \left(\frac{k}{y} - \beta \right) \psi \right]' \\
 &= (y^k e^{-\beta y} \phi')' + \left(\frac{k}{y} - \beta \right) \psi' + \left(\frac{k}{y} - \beta \right)' \psi \\
 &= y^k e^{-\beta y} \phi'' + \left(\frac{k}{y} - \beta \right) y^k e^{-\beta y} \phi' + \left(\frac{k}{y} - \beta \right) \psi' - \frac{k}{y^2} \psi \\
 (3.119) \Rightarrow &= y^k e^{-\beta y} \phi'' + 2 \left(\frac{k}{y} - \beta \right) y^k e^{-\beta y} \phi' \\
 &\quad + \left(\frac{k^2 - k}{y^2} - \frac{2\beta k}{y} + \beta^2 \right) \psi.
 \end{aligned} \tag{3.120}$$

Підставивши (3.117), (3.119) і (3.120) у (3.108), після зведення подібних та скорочення на $y^k e^{-\beta y} \neq 0 \forall y$ отримаємо диференціальне рівняння для ϕ

$$y^2 \phi'' + [(1 + 2k)y - 2\beta y^2] \phi' + 2\beta y \left(\beta - k - \frac{1}{2} \right) \phi = 0, \tag{3.121}$$

де використано, що $k^2 = -\varepsilon$, див. (3.116).

Представимо ϕ у вигляді ряду

$$\phi(y) = \sum_{q=0}^{\infty} a_q y^q, \tag{3.122}$$

що після підстановки в (3.121) дає

$$\begin{aligned}
 &\sum_{q=0}^{\infty} q(q-1) a_q y^q + (1+2k) \sum_{q=0}^{\infty} q a_q y^q \\
 &\quad - 2\beta \sum_{q=0}^{\infty} q a_q y^{q+1} + 2\beta \left(\beta - k - \frac{1}{2} \right) \sum_{q=0}^{\infty} a_q y^{q+1} = 0 \\
 \Rightarrow &\sum_{q=0}^{\infty} q(q+2k) a_q y^q + 2\beta \sum_{q=0}^{\infty} \left(\beta - k - q - \frac{1}{2} \right) a_q y^{q+1} = 0.
 \end{aligned} \tag{3.123}$$

Як можна бачити, у 3-му рядку (3.123) в 1-й сумі доданок при $q = 0$ рівний нулю, тому відмінні від 0 доданки в цій сумі можуть починатися

лише з $q = 1$. В результаті (3.123) можна переписати наступним чином:

$$\begin{aligned}
 (3.123) \Rightarrow & \sum_{q=1}^{\infty} q(q+2k) a_q y^q \\
 & + 2\beta \sum_{q=0}^{\infty} \left(\beta - k - q - \frac{1}{2} \right) a_q y^{q+1} = 0 \\
 \left| q = \tilde{q} + 1 \right| \Rightarrow & \sum_{\tilde{q}=0}^{\infty} (\tilde{q} + 1) (\tilde{q} + 1 + 2k) a_{\tilde{q}+1} y^{\tilde{q}+1} \\
 & + 2\beta \sum_{q=0}^{\infty} \left(\beta - k - q - \frac{1}{2} \right) a_q y^{q+1} = 0 \quad (3.124) \\
 \tilde{q} \rightarrow q \Rightarrow & \sum_{q=0}^{\infty} \left[(q+1) (q+1+2k) a_{q+1} \right. \\
 & \left. + 2\beta \left(\beta - k - q - \frac{1}{2} \right) a_q \right] y^{q+1} = 0 \\
 \Leftrightarrow & (q+1) (q+1+2k) a_{q+1} \\
 & + 2\beta \left(\beta - k - q - \frac{1}{2} \right) a_q = 0,
 \end{aligned}$$

де в останньому рядку було використано те, що члени степеневого ряду лінійно незалежні. Отже, остаточно з (3.124) отримуємо рекурентне співвідношення для коефіцієнтів a_q :

$$a_{q+1} = 2\beta \frac{q + k + \frac{1}{2} - \beta}{(q+1)(q+1+2k)} a_q, \quad (3.125)$$

за допомогою якого можна визначити всі коефіцієнти ряду (3.122) через перший, який у свою чергу знаходиться з умови нормування хвильової функції.

3.4.5 Умова обриву ряду

Дослідимо асимптотичну поведінку коефіцієнтів a_q . З (3.125)

$$a_{q+1} \Big|_{q \rightarrow \infty} = \frac{2\beta}{q} a_q. \quad (3.126)$$

Порівнявши (3.126) з

$$\begin{aligned}
 e^{2\beta\zeta} &= \sum_{q=0}^{\infty} \frac{(2\beta)^q}{q!} \zeta^q \\
 &= \sum_{q=0}^{\infty} c_q \zeta^q \\
 \Rightarrow \quad c_{q+1} &= \frac{(2\beta)^{q+1}}{(q+1)!} \\
 &= \frac{2\beta}{q+1} c_q \\
 c_{q+1} \Big|_{q \rightarrow \infty} &= \frac{2\beta}{q} c_q,
 \end{aligned} \tag{3.127}$$

бачимо, що ϕ асимптотично веде себе як

$$\phi \sim e^{2\beta y}. \tag{3.128}$$

Підставивши асимптотичний вираз (3.128) у вираз для повної хвильової функції ψ (3.117), отримуємо, що

$$\begin{aligned}
 \psi &= y^k e^{-\beta y} e^{2\beta y} \\
 &= y^k e^{\beta y},
 \end{aligned} \tag{3.129}$$

тобто що повна хвильова функція експоненціально розбігається. Це суперечить умові обмеженості хвильової функції.

Щоб задовольнити цю умову, необхідно **обірвати ряд** (3.122). Іншими словами, накладемо умову, що існує таке фіксоване значення $n < \infty$, для якого

$$\begin{aligned}
 a_{n+1} &= 0, \quad a_n \neq 0 \\
 (3.125) \Rightarrow \quad a_{n+1} &= 2\beta \frac{n+k+\frac{1}{2}-\beta}{(n+1)(n+1+2k)} a_n \\
 \Leftrightarrow \quad n+k+\frac{1}{2}-\beta &= 0.
 \end{aligned} \tag{3.130}$$

При цьому, як видно з рекурентного співвідношення (3.125), всі наступні коефіцієнти ряду також будуть рівні 0. Це означає, що функція ϕ є поліном степеню $n < \infty$, і тому повна хвильова функція не розбігається.

3.4.6 Енергетичний спектр

З (3.130) отримуємо **енергетичний спектр**:

$$\begin{aligned}
 k &= \beta - \left(n + \frac{1}{2}\right) \\
 (3.109) \Rightarrow k &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \frac{V_0}{\alpha^2}} - \left(n + \frac{1}{2}\right) \\
 (3.116), (3.109) \Rightarrow \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2} \frac{E}{\alpha^2}} &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \frac{V_0}{\alpha^2}} - \left(n + \frac{1}{2}\right) \\
 \Rightarrow E_n &= -V_0 \left[1 - \frac{\alpha \hbar}{\sqrt{2mV_0}} \left(n + \frac{1}{2}\right)\right]^2,
 \end{aligned} \tag{3.131}$$

де $n = 0, 1, 2, \dots$.

Як бачимо, енергетичний спектр частинки залежить від числа n , тобто є **дискретним**: частинка в даному потенціалі може мати лише значення енергії, рівні E_n .

Оскільки $k > 0$, див. (3.116), то з 2-го рядка (3.131)

$$\begin{aligned}
 k &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \frac{V_0}{\alpha^2}} - \left(n + \frac{1}{2}\right) > 0 \\
 \Rightarrow 0 \leq n &\leq n_{\max} < \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \frac{V_0}{\alpha^2}} - \frac{1}{2},
 \end{aligned} \tag{3.132}$$

тобто **кількість рівнів спектру обмежена**.

Якщо

$$\begin{aligned}
 \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \frac{V_0}{\alpha^2}} - \frac{1}{2} &< 0 \\
 \Rightarrow V_0 &< \frac{\alpha^2 \hbar^2}{8m} \\
 (3.132) \Leftrightarrow 0 \leq n_{\max} &< 0,
 \end{aligned} \tag{3.133}$$

то в такому випадку спектр взагалі відсутній.

3.5 Потенціал Пешль-Теллера

Задача 93. Знайти енергетичний спектр та хвильові функції частинки маси m у **потенціалі Пешль-Теллера**

$$V(x) = -\frac{V_0}{\cosh^2 \alpha x}. \quad (3.134)$$

Розв'язок.

Для енергій $E > 0$, як слідує з (3.134), спектр буде неперервний.

Розглянемо область енергій $E < 0$.

3.5.1 Рівняння Шредінгера

Потенціал (3.134) не залежить від часу, отже необхідно розв'язати наступне стаціонарне рівняння Шредінгера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 - \frac{V_0}{\cosh^2 \alpha x} \right] \psi = E \psi, \quad (3.135)$$

де $E < 0$.

Введемо наступну заміну змінних:

$$y = \tanh \alpha x, \quad -1 < y < 1. \quad (3.136)$$

Тоді для оператора ∂_x маємо

$$\begin{aligned} \partial_x &\equiv \frac{d}{dx} \\ &= \frac{dy}{dx} \frac{d}{dy} \\ &= (\partial_x y) \partial_y \\ (3.136) \Rightarrow &= (\tanh \alpha x)' \partial_y \\ &= \frac{\alpha}{\cosh^2 \alpha x} \partial_y \\ &= \alpha (1 - \tanh^2 \alpha x) \partial_y \\ (3.136) \Rightarrow &= \alpha (1 - y^2) \partial_y, \end{aligned} \quad (3.137)$$

де у 3-му рядку дужки $()$ означають, що оператор похідної ∂_x діє **лише** на вираз у дужках (в даному випадку на змінну y), і ні на що інше.

Перепишемо рівняння Шредінгера (3.135) через нову змінну y

$$\begin{aligned}
 (3.136) \Rightarrow & \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 - V_0 (1 - y^2) \right] \psi = E\psi \\
 \partial_x^2 = \partial_x \partial_x, (3.137) \Rightarrow & (1 - y^2) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \alpha^2 \partial_y (1 - y^2) \partial_y - V_0 \right] \psi = E\psi \\
 \Rightarrow & \left[\partial_y (1 - y^2) \partial_y + \beta - \frac{\varepsilon}{1 - y^2} \right] \psi = 0,
 \end{aligned} \tag{3.138}$$

де введено позначення

$$\begin{aligned}
 \beta &= \frac{2m}{\hbar^2} \frac{V_0}{\alpha^2}, \quad \beta > 0 \\
 \varepsilon &= -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{E}{\alpha^2}, \quad \varepsilon > 0.
 \end{aligned} \tag{3.139}$$

Оскільки змінна y обмежена, $-1 < y < 1$, то можна зробити ще одну заміну змінних

$$y = \cos \theta, \quad 0 < \theta < \pi. \tag{3.140}$$

Тоді для оператора ∂_y маємо

$$\begin{aligned}
 \partial_y &= (\partial_y \theta) \partial_\theta \\
 \left| \frac{dx}{dz} = \left(\frac{dz}{dx} \right)^{-1} \right| \Rightarrow &= \frac{1}{(\partial_\theta y)} \partial_\theta \\
 (3.140) \Rightarrow &= -\frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta,
 \end{aligned} \tag{3.141}$$

де оператор у круглих дужках діє лише на те, що всередині дужок, і ні на що інше.

Для рівняння Шредінгера, див. останній рядок (3.138), тоді маємо

$$\begin{aligned}
 (3.138), (3.140) \Rightarrow & \left[\partial_y (\sin^2 \theta) \partial_y + \beta - \frac{\varepsilon}{\sin^2 \theta} \right] \psi = 0 \\
 (3.141) \Rightarrow & \left[\frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta \sin(\theta) \partial_\theta + \beta - \frac{\varepsilon}{\sin^2 \theta} \right] \psi = 0.
 \end{aligned} \tag{3.142}$$

Останній вираз у (3.142) співпадає з рівнянням для приєднаних поліномів Лежандра $P_l^\mu = P_l^\mu(\cos \theta)$, $l = 0, 1, \dots$, $\mu = \overline{0, l}$

$$\left[\frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta \sin(\theta) \partial_\theta + l(l+1) - \frac{\mu^2}{\sin^2 \theta} \right] P_l^\mu = 0, \tag{3.143}$$

якщо ввести перепозначення

$$\begin{aligned}
 \beta &= l(l+1) \quad \Leftrightarrow \quad l = \frac{\sqrt{4\beta+1}-1}{2} \\
 \varepsilon &= \mu^2.
 \end{aligned} \tag{3.144}$$

3.5.2 Енергетичний спектр

Введемо квантове число $n = l - \mu$. Тоді

$$\begin{aligned}
 \left| l \geq \mu \right| &\Rightarrow n = l - \mu \geq 0 \\
 (3.144) &\Rightarrow = \frac{\sqrt{4\beta + 1} - 1}{2} - \sqrt{\varepsilon} \\
 (3.139) &\Rightarrow = \frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{8m}{\hbar^2} \frac{V_0}{\alpha^2} + 1} - 1 \right) - \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \frac{(-E)}{\alpha^2}}.
 \end{aligned} \tag{3.145}$$

З (3.145) отримуємо **енергетичний спектр частинки у потенціалі Пешль-Теллера**

$$E_n = -\frac{\alpha^2}{4} \frac{\hbar^2}{2m} \left(2n + 1 - \sqrt{\frac{8m}{\hbar^2} \frac{V_0}{\alpha^2} + 1} \right)^2. \tag{3.146}$$

Для β також можна записати, що

$$\begin{aligned}
 (3.144) &\Rightarrow \beta = l(l + 1) \\
 (3.145) &\Rightarrow = (n + \mu)(n + \mu + 1) \\
 (3.144) &\Rightarrow = (n + \sqrt{\varepsilon})(n + \sqrt{\varepsilon} + 1) \\
 &= n(n + 1) + \sqrt{\varepsilon}(2n + \sqrt{\varepsilon} + 1) \\
 \left| \sqrt{\varepsilon} > 0 \right| &\Rightarrow > n(n + 1),
 \end{aligned} \tag{3.147}$$

тобто кількість рівнів **є обмеженою**.

3.6 Гармонічний осцилятор

Задача 94. Знайти рівні енергії та хвильові функції для частинки маси m у потенціалі гармонічного осцилятора з частотою ω

$$V(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2. \quad (3.148)$$

Розв'язок.

3.6.1 Рівняння Шредінгера

Для потенціалу (3.148) стаціонарне рівняння Шредінгера має вигляд

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \right) \psi = E\psi \\ \Rightarrow & \left(\partial_x^2 - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2 + \frac{2m}{\hbar^2}E \right) \psi = 0 \\ |x = \alpha y| \Rightarrow & \left(\frac{1}{\alpha^2}\partial_y^2 - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}\alpha^2 y^2 + \frac{2m}{\hbar^2}E \right) \psi = 0, \end{aligned} \quad (3.149)$$

де $\alpha = \text{const.}$ Якщо вибрати α наступним чином

$$\alpha = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad (3.150)$$

то рівняння Шредінгера (3.149) матиме вигляд

$$(\partial_y^2 - y^2 + \lambda) \psi = 0, \quad (3.151)$$

де введено позначення

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}. \quad (3.152)$$

3.6.2 Рівняння Шредінгера: асимптотичний розв'язок

Для $y \rightarrow \pm\infty$ у рівнянні (3.151) можна знехтувати λ (оскільки вона є константою), що дає асимптотичне рівняння

$$\partial_y^2 \psi_\infty - y^2 \psi_\infty = 0, \quad (3.153)$$

асимптотичні розв'язки якого

$$\psi_\infty \sim e^{\pm y^2/2}. \quad (3.154)$$

З умови скінченності хвильової функції необхідно відкинути в (3.154) розв'язок $e^{y^2/2}$. Отже, остаточно асимптотичний розв'язок (3.153) буде

$$\psi_\infty = e^{-y^2/2}. \quad (3.155)$$

3.6.3 Рівняння Шредінгера: повний розв'язок

Повний розв'язок рівняння Шредінгера (3.151) шукатимемо у вигляді

$$\begin{aligned}\psi &= \psi_\infty \phi \\ &= e^{-y^2/2} \phi.\end{aligned}\tag{3.156}$$

Знайдемо $\partial_y \psi = \psi'$:

$$\begin{aligned}(3.156) \Rightarrow \psi' &= \left(e^{-y^2/2} \phi \right)' \\ &= e^{-y^2/2} \phi' - y e^{-y^2/2} \phi \\ (3.156) \Rightarrow &= e^{-y^2/2} \phi' - y \psi.\end{aligned}\tag{3.157}$$

Друга похідна $\partial_y^2 \psi = \psi''$:

$$\begin{aligned}\psi'' &= (\psi')' \\ (3.157) \Rightarrow &= \left(e^{-y^2/2} \phi' - y \psi \right)' \\ &= e^{-y^2/2} \phi'' - y e^{-y^2/2} \phi' - y \psi' - \psi \\ (3.157) \Rightarrow &= e^{-y^2/2} \phi'' - 2y e^{-y^2/2} \phi' + (y^2 - 1) \psi \\ (3.156) \Rightarrow &= e^{-y^2/2} [\phi'' - 2y \phi' + (y^2 - 1) \phi].\end{aligned}\tag{3.158}$$

Підставивши (3.158) та (3.156) в (3.151), отримуємо наступне диференціальне рівняння для ϕ

$$\phi'' - 2y \phi' + (\lambda - 1) \phi = 0.\tag{3.159}$$

Представимо ϕ у вигляді степеневого ряду

$$\phi = \sum_{k=0}^{\infty} a_k y^k.\tag{3.160}$$

Підставивши (3.160) у (3.159), отримаємо

$$\begin{aligned}
& \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) a_k y^{k-2} + \sum_{k=0}^{\infty} (\lambda - 2k - 1) a_k y^k = 0 \\
\Rightarrow & \sum_{k=2}^{\infty} k(k-1) a_k y^{k-2} + \sum_{k=0}^{\infty} (\lambda - 2k - 1) a_k y^k = 0 \\
\left| q = k - 2 \right| \Rightarrow & \sum_{q=0}^{\infty} (q+2)(q+1) a_{q+2} y^q + \sum_{k=0}^{\infty} (\lambda - 2k - 1) a_k y^k = 0 \\
\left| q \rightarrow k \right| \Rightarrow & \sum_{k=0}^{\infty} (k+2)(k+1) a_{k+2} y^k + \sum_{k=0}^{\infty} (\lambda - 2k - 1) a_k y^k = 0 \\
\Rightarrow & \sum_{k=0}^{\infty} [(k+2)(k+1) a_{k+2} + (\lambda - 2k - 1) a_k] y^k = 0 \\
\Leftrightarrow & (k+2)(k+1) a_{k+2} + (\lambda - 2k - 1) a_k = 0,
\end{aligned} \tag{3.161}$$

де у другому рядку використано, що перші 2 доданки першої суми рівні нулю.

Остання рівність (3.161) виконується тому, що члени степеневого ряду лінійно незалежні.

З останнього рядка (3.161) маємо **рекурентне співвідношення для коефіцієнтів** a_k :

$$a_{k+2} = \frac{2k+1-\lambda}{(k+2)(k+1)} a_k. \tag{3.162}$$

3.6.4 Умова обриву ряду

Запишемо ряд Тейлора для e^{y^2} :

$$\begin{aligned}
e^{y^2} &= \sum_{q=0}^{\infty} \frac{y^{2q}}{q!} \\
&= \sum_{q=0}^{\infty} c_{2q} y^{2q} \\
\Rightarrow & c_{2q} = \frac{1}{q!} \\
\Rightarrow & \left. \frac{c_{2q+2}}{c_{2q}} \right|_{q \rightarrow \infty} = \left. \frac{1}{q+1} \right|_{q \rightarrow \infty} \\
&= \frac{1}{q}.
\end{aligned} \tag{3.163}$$

З (3.162)

$$\left. \frac{a_{k+2}}{a_k} \right|_{k \rightarrow \infty} = \left. \frac{2k+1-\lambda}{(k+2)(k+1)} \right|_{k \rightarrow \infty} = \frac{2}{k}, \quad (3.164)$$

що, як видно, співпадає з (3.163) при заміні $k = 2q$. Отже, як бачимо, для достатньо великих k функція ϕ веде себе як e^{y^2} . Тоді хвильова функція $\psi \sim e^{y^2/2}$, див. (3.156), що суперечить умові скінченності хвильової функції.

Щоб забезпечити умову скінченності хвильової функції, необхідно обірвати ряд (3.160), тобто покласти, що для якогось фіксованого значення $k = n$

$$\begin{cases} a_{n+2} = 0 \\ a_n \neq 0 \end{cases} \quad (3.165)$$

$$(3.162) \Rightarrow 2n+1-\lambda=0.$$

Виконання (3.165) означає, що функція ϕ — поліноміальна, а отже, хвильова функція ψ — обмежена, див. (3.156).

3.6.5 Енергетичний спектр

Підставивши (3.152) у (3.165), отримуємо **енергетичний спектр гармонічного осцилятора**

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.166)$$

Енергетичні рівні квантового осцилятора **еквідистантні**:

$$\begin{aligned} \forall n \quad \Delta E_n &= E_{n+1} - E_n \\ (3.166) \Rightarrow &= \hbar\omega = \text{const}, \end{aligned} \quad (3.167)$$

тобто відстань між довільними двома сусідніми рівнями рівна $\hbar\omega$.

Основному рівню E_0 , як видно з (3.166), відповідає енергія

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \neq 0. \quad (3.168)$$

Примітка. Класичний осцилятор, на відміну від квантового, має мінімальну енергію, рівну 0. Відмінність від 0 для основного рівня енергії квантового осцилятора є проявом саме хвильових властивостей. Дану енергію неможливо видобути з осцилятора, оскільки не існує рівня з енергією, меншою за $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$. Цей рівень описує т.зв. **нульові коливання вакууму** та є причиною **ефекту Казимира**.

3.6.6 Хвильова функція

Як видно з (3.151), дане рівняння симетричне відносно заміни $y \rightarrow -y$. Відповідно, такою ж симетрією повинні володіти і його розв'язки. Це означає, що множина розв'язків $\{\psi_n\}$ розпадається на парні та непарні.

Знаючи номер рівня n , за допомогою (3.162) можна визначити всі коефіцієнти ряду (3.160) через a_0 (для парних розв'язків) або ж a_1 (для непарних). Останні, у свою чергу, можна знайти з умови нормування хвильової функції.

Разом з тим, знайти хвильові функції можна швидше, якщо звести задачу до вже відомої. Зокрема, якщо підставити λ з (3.165) у (3.159), то отримаємо наступне диференціальне рівняння

$$\phi_n'' - 2y\phi_n' + 2n\phi_n = 0, \quad (3.169)$$

розв'язками якого, як відомо, є **поліноми Чебишева-Ерміта** $H_n(y)$

$$\phi_n \equiv H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \partial_y^n e^{-y^2}, \quad (3.170)$$

для яких виконується наступне співвідношення ортогональності

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_n(y) H_q(y) e^{-y^2} dy = n! 2^n \sqrt{\pi} \delta_{nq}, \quad (3.171)$$

де δ_{nq} — символ δ -Кroneкера.

Отже, ми можемо одразу записати **хвильову функцію осцилятора** ψ_n для рівня енергії E_n (A_n — константа нормування):

$$\begin{aligned} (3.156) &\Rightarrow \psi_n = A_n e^{-y^2/2} \phi_n \\ (3.170) &\Rightarrow \quad = A_n e^{-y^2/2} H_n(y) \\ \left| y = \frac{x}{\alpha} \right|, (3.150) &\Rightarrow \quad = A_n e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \\ (3.171) &\Rightarrow \quad = \frac{1}{\sqrt{n! 2^n}} \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right). \end{aligned} \quad (3.172)$$

Задача 95. Знайти рівні енергії та хвильові функції для частинки маси m у тривимірному осциляторному потенціалі

$$V(\vec{r}) = \frac{m}{2} (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2). \quad (3.173)$$

3.7 Гармонічний осцилятор: формалізм операторів народження та знищення

Задача 96. Знайти рівні енергії та хвильові функції для осциляторного потенціалу

$$\hat{V} = V(\hat{x}) = \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2, \quad (3.174)$$

де m — маса частинки, ω — частота осцилятора, використовуючи формалізм операторів народження та знищення.

Розв'язок.

3.7.1 Оператори народження \hat{a}^\dagger та знищення \hat{a} : означення і властивості

Оператори народження \hat{a}^\dagger та знищення \hat{a} визначаються як

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} \hat{p} \right) \\ \hat{a} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} \hat{p} \right), \end{aligned} \quad (3.175)$$

де m, ω — сталі, \hat{x} — оператор координати, \hat{p} — оператор імпульсу, для яких, як відомо,

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar. \quad (3.176)$$

Як можна бачити з (3.175), дані оператори **не ермітові**:

$$\begin{aligned} (3.175) \Rightarrow (\hat{a}^\dagger)^\dagger &= \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} \hat{p} \right) \right]^\dagger \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} \right)^\dagger - \left(\frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} \hat{p} \right)^\dagger \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x}^\dagger + \frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} \hat{p}^\dagger \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} \hat{p} \right] \\ &= \hat{a} \\ &\neq \hat{a}^\dagger, \end{aligned} \quad (3.177)$$

тобто операторам народження та знищення **не відповідає жодна спостережувана величина**.

Комутатор операторів народження та знищення:

$$\begin{aligned}
 (3.175) \Rightarrow [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= \frac{1}{2} \left[\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} \hat{p} \right), \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} \hat{p} \right) \right] \\
 &= \frac{m\omega}{2\hbar} [\hat{x}, \hat{x}] - \frac{i}{2\hbar} [\hat{x}, \hat{p}] + \frac{i}{2\hbar} [\hat{p}, \hat{x}] + \frac{1}{2m\hbar\omega} [\hat{p}, \hat{p}] \\
 &= -\frac{i}{2\hbar} [\hat{x}, \hat{p}] + \frac{i}{2\hbar} [\hat{p}, \hat{x}] \\
 &= -\frac{i}{\hbar} [\hat{x}, \hat{p}] \\
 (3.176) \Rightarrow &= 1.
 \end{aligned} \tag{3.178}$$

Знайдемо добуток $\hat{a}^\dagger \hat{a}$:

$$\begin{aligned}
 (3.175) \Rightarrow \hat{a}^\dagger \hat{a} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} \hat{p} \right) \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} \hat{p} \right) \\
 &= \frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} \hat{p} \right) \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} \hat{p} \right) \\
 &= \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 + \frac{1}{2m\hbar\omega} \hat{p}^2 + \frac{i}{2\hbar} (\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}) \\
 &= \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 + \frac{1}{2m\hbar\omega} \hat{p}^2 + \frac{i}{2\hbar} [\hat{x}, \hat{p}] \\
 (3.176) \Rightarrow &= \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 + \frac{1}{2m\hbar\omega} \hat{p}^2 - \frac{1}{2}.
 \end{aligned} \tag{3.179}$$

Добуток операторів $\hat{a}\hat{a}^\dagger$:

$$\begin{aligned}
 \hat{a}\hat{a}^\dagger &= \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a}^\dagger \hat{a} \\
 &= [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] + \hat{a}^\dagger \hat{a} \\
 (3.178) \Rightarrow &= 1 + \hat{a}^\dagger \hat{a} \\
 (3.179) \Rightarrow &= \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 + \frac{1}{2m\hbar\omega} \hat{p}^2 + \frac{1}{2}.
 \end{aligned} \tag{3.180}$$

Вирази для операторів народження \hat{a}^\dagger та знищення \hat{a} можна переписати у простішому вигляді, ввівши безрозмірний оператор

$$\hat{y} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x}. \tag{3.181}$$

3.7. Гармонічний осцилятор: формалізм операторів народження та знищення 83

Тоді в координатному представленні оператор імпульсу \hat{p}

$$\begin{aligned}\hat{p} &= -i\hbar\partial_x \\ &= -i\hbar(\partial_x y)\partial_y \\ (3.181) \Rightarrow &= -i\sqrt{m\hbar\omega}\partial_y,\end{aligned}\tag{3.182}$$

де дужки у 2-му рядку означають, що оператор ∂_x всередині них діє лише на вираз у дужках, і ні на що інше.

Підставивши (3.181) та (3.182) в означення операторів \hat{a}^\dagger, \hat{a} , отримаємо **оператори народження та знищення у безрозмірних змінних**:

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{y} - \partial_y) \\ \hat{a} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{y} + \partial_y).\end{aligned}\tag{3.183}$$

Розв'язавши СЛАР (3.183) відносно операторів \hat{y} та ∂_y , отримуємо

$$\begin{aligned}\hat{y} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \\ \partial_y &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger).\end{aligned}\tag{3.184}$$

3.7.2 Гамільтоніан осцилятора через оператори \hat{a}^\dagger, \hat{a}

Запишемо гамільтоніан \hat{H} для потенціалу (3.174):

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \hat{V} \\ (3.174) \Rightarrow &= \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 \\ &= \hbar\omega\left(\frac{1}{2m\hbar\omega}\hat{p}^2 + \frac{m\omega}{2\hbar}\hat{x}^2\right) \\ (3.179) \Rightarrow &= \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right).\end{aligned}\tag{3.185}$$

Отже, як слідує з (3.185), рівняння Шредінгера для гармонічного осцилятора можна записати через оператори народження та знищення (3.175) як

$$\hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right)\psi = E\psi.\tag{3.186}$$

3.7.3 Фізичний зміст операторів \hat{a}^\dagger, \hat{a}

Подіємо на (3.186) зліва оператором \hat{a}^\dagger :

$$\begin{aligned}
 \left| \hat{a}^\dagger \bullet, (3.186) \right| &\Rightarrow \hat{a}^\dagger \hbar \omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \psi = \hat{a}^\dagger E \psi \\
 &\Rightarrow \hbar \omega \hat{a}^\dagger \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \psi = E \hat{a}^\dagger \psi \\
 (3.178) &\Rightarrow \hbar \omega \hat{a}^\dagger \left(\hat{a} \hat{a}^\dagger - 1 + \frac{1}{2} \right) \psi = E \hat{a}^\dagger \psi \\
 &\Rightarrow \hbar \omega \hat{a}^\dagger \left(\hat{a} \hat{a}^\dagger + \frac{1}{2} \right) \psi = (E \hat{a}^\dagger + \hbar \omega \hat{a}^\dagger) \psi \\
 &\Rightarrow \hbar \omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}^\dagger + \frac{1}{2} \hat{a}^\dagger \right) \psi = (E \hat{a}^\dagger + \hbar \omega \hat{a}^\dagger) \psi \\
 &\Rightarrow \hbar \omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \hat{a}^\dagger \psi = (E + \hbar \omega) \hat{a}^\dagger \psi.
 \end{aligned} \tag{3.187}$$

Тобто ми отримали, що:

- якщо функції ψ відповідає власне значення енергії E , то функції $\phi = \hat{a}^\dagger \psi$ — власне значення енергії $E + \hbar \omega$
- якщо ψ є власною функцією гамільтоніана \hat{H} , то $\hat{a}^\dagger \psi$ також є власною функцією \hat{H} .

Отже, **фізичний зміст оператора народження** \hat{a}^\dagger полягає в тому, що він переводить стан системи з енергією E у стан з енергією $E + \hbar \omega$ (“**народжує**” квант енергії $\hbar \omega$).

Узагальнюючи (3.187), отримуємо, що

$$\begin{aligned}
 (3.186) &\Rightarrow \psi: & E \\
 (3.187) &\Rightarrow \hat{a}^\dagger \psi: & E + \hbar \omega \\
 (3.187) &\Rightarrow (\hat{a}^\dagger)^2 \psi: & E + 2\hbar \omega \\
 &\dots \\
 (3.187) &\Rightarrow (\hat{a}^\dagger)^n \psi: & E + n\hbar \omega.
 \end{aligned} \tag{3.188}$$

Подіємо на (3.186) зліва оператором \hat{a} :

$$\begin{aligned}
 \left| \hat{a} \bullet, (3.186) \right| &\Rightarrow \hat{a} \hbar \omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \psi = \hat{a} E \psi \\
 &\Rightarrow \hbar \omega \left(\hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \hat{a} \right) \psi = E \hat{a} \psi \\
 &\Rightarrow \hbar \omega \left(\hat{a} \hat{a}^\dagger + \frac{1}{2} \right) \hat{a} \psi = E \hat{a} \psi \\
 (3.178) &\Rightarrow \hbar \omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1 + \frac{1}{2} \right) \hat{a} \psi = E \hat{a} \psi \\
 &\Rightarrow \hbar \omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \hat{a} \psi = (E \hat{a} - \hbar \omega \hat{a}) \psi \\
 &\Rightarrow \hbar \omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \hat{a} \psi = (E - \hbar \omega) \hat{a} \psi.
 \end{aligned} \tag{3.189}$$

Тобто ми отримали, що:

- якщо функції ψ відповідає власне значення енергії E , то функції $\chi = \hat{a} \psi$ — власне значення енергії $E - \hbar \omega$
- якщо ψ є власною функцією гамільтоніана \hat{H} , то $\hat{a} \psi$ також є власною функцією \hat{H} .

Отже, **фізичний зміст оператора знищення \hat{a}** полягає в тому, що він переводить стан системи з енергією E у стан з енергією $E - \hbar \omega$ (“**знищує**” квант енергії $\hbar \omega$).

Узагальнюючи (3.189), отримуємо, що

$$\begin{aligned}
 (3.186) &\Rightarrow \psi: E \\
 (3.189) &\Rightarrow \hat{a} \psi: E - \hbar \omega \\
 (3.189) &\Rightarrow \hat{a}^2 \psi: E - 2\hbar \omega \\
 &\dots \\
 (3.189) &\Rightarrow \hat{a}^n \psi: E - n\hbar \omega.
 \end{aligned} \tag{3.190}$$

3.7.4 Основний стан осцилятора

Позначимо нормовану хвильову функцію основного стану осцилятора через ψ_0 та формально обчислимо середнє значення гамільтоніана $\langle \hat{H} \rangle_0$

у цьому стані:

$$\begin{aligned}
 E_0 &\equiv \langle \hat{H} \rangle_0 = \int \psi_0^* \hat{H} \psi_0 dq \\
 (3.185) \Rightarrow &= \int \psi_0^* \hbar \omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \psi_0 dq \\
 &= \hbar \omega \int \psi_0^* \hat{a}^\dagger \hat{a} \psi_0 dq + \frac{\hbar \omega}{2} \int \psi_0^* \psi_0 dq \\
 \left| \int \psi_0^* \psi_0 dq = 1 \right| &= \hbar \omega \int \psi_0^* \hat{a}^\dagger (\hat{a} \psi_0) dq + \frac{\hbar \omega}{2} \\
 &= \hbar \omega \int \left[(\hat{a}^\dagger)^\dagger \psi_0 \right]^* (\hat{a} \psi_0) dq + \frac{\hbar \omega}{2} \\
 (3.177) \Rightarrow &= \hbar \omega \int (\hat{a} \psi_0)^* (\hat{a} \psi_0) dq + \frac{\hbar \omega}{2} \\
 &= \hbar \omega \int |\hat{a} \psi_0|^2 dq + \frac{\hbar \omega}{2} \\
 &\geq \frac{\hbar \omega}{2}.
 \end{aligned} \tag{3.191}$$

Отже, як видно з (3.191), енергія основного стану E_0 обмежена знизу мінімумом $\frac{\hbar \omega}{2} \neq 0$. Разом з тим, як відомо, основний стан — це стан із мінімально можливою енергією. Оскільки мінімумом є $\frac{\hbar \omega}{2}$, то можна покласти

$$E_0 = \frac{\hbar \omega}{2}, \tag{3.192}$$

що можливо лише за умови

$$\hat{a} \psi_0 = 0. \tag{3.193}$$

Вираз (3.193) — це **означення основного стану у представленні операторів народження та знищення**.

Хвильову функцію ψ_0 можна знайти в явному вигляді, підставивши означення оператора \hat{a} з (3.183) у (3.193):

$$\begin{aligned}
 (3.183), (3.193) \Rightarrow & \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{y} + \partial_y) \psi_0 = 0 \\
 \Rightarrow & \partial_y \psi_0 = -y \psi_0 \\
 \left| \bullet \frac{dy}{\psi_0} \right| \Rightarrow & \frac{d\psi_0}{\psi_0} = -y dy \\
 \Rightarrow & \psi_0 = C_0 e^{-y^2/2},
 \end{aligned} \tag{3.194}$$

3.7. Гармонічний осцилятор: формалізм операторів народження та знищення 87

де C_0 — стала. Її значення знаходимо з умови нормування:

$$\begin{aligned}
 1 &= \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_0|^2 dx \\
 (3.194) \Rightarrow &= |C_0|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} dx \\
 (3.181) \Rightarrow &= |C_0|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-m\omega x^2/\hbar} dx \quad (3.195) \\
 &= |C_0|^2 \sqrt{\pi} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \\
 \Rightarrow C_0 &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4}.
 \end{aligned}$$

Піставивши (3.195) у (3.194), знаходимо **хвильову функцію основного стану осцилятора** ψ_0 :

$$\begin{aligned}
 (3.194), (3.195) \Rightarrow \psi_0 &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-y^2/2} \\
 (3.181) \Rightarrow &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right). \quad (3.196)
 \end{aligned}$$

3.7.5 Енергетичний спектр

Як видно з (3.187) та (3.188), функція $(\hat{a}^\dagger)^n \psi_0$ також є власною функцією гамільтоніана \hat{H} . Позначивши відповідне цій функції власне значення енергії через E_n , отримаємо **енергетичний спектр гармонічного осцилятора**

$$\begin{aligned}
 (3.187), (3.188) \Rightarrow E_n &= E_0 + n\hbar\omega \\
 (3.192) \Rightarrow &= \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (3.197)
 \end{aligned}$$

3.7.6 Власні функції гамільтоніана \hat{H}

Як встановлено вище, функція $(\hat{a}^\dagger)^n \psi_0$ є власною функцією з енергією E_n , що визначається виразом (3.197). Разом з тим, дана функція в загальному випадку ненормована. Для забезпечення умови нормування домножимо її на сталу нормування A_n

$$\psi_n = A_n (\hat{a}^\dagger)^n \psi_0, \quad A_n: \int \psi_n^* \psi_n dq = 1. \quad (3.198)$$

З (3.198) очевидно, що $A_0 = 1$.

Оскільки ψ_n — нормована хвильова функція, то

$$\begin{aligned}
 1 &= \int \psi_n^* \psi_n dq \\
 (3.198) \Rightarrow &= |A_n|^2 \int [(\hat{a}^\dagger)^n \psi_0]^* (\hat{a}^\dagger)^n \psi_0 dq \\
 &= |A_n|^2 \int [\hat{a}^\dagger (\hat{a}^\dagger)^{n-1} \psi_0]^* \hat{a}^\dagger (\hat{a}^\dagger)^{n-1} \psi_0 dq \\
 (3.198) \Rightarrow &= |A_n|^2 \int \left(\hat{a}^\dagger \frac{\psi_{n-1}}{A_{n-1}} \right)^* \hat{a}^\dagger \frac{\psi_{n-1}}{A_{n-1}} dq \\
 &= \frac{|A_n|^2}{|A_{n-1}|^2} \int (\hat{a}^\dagger \psi_{n-1})^* \hat{a}^\dagger \psi_{n-1} dq \\
 &= \frac{|A_n|^2}{|A_{n-1}|^2} \int \psi_{n-1}^* \hat{a} \hat{a}^\dagger \psi_{n-1} dq \tag{3.199} \\
 (3.178) \Rightarrow &= \frac{|A_n|^2}{|A_{n-1}|^2} \int \psi_{n-1}^* (\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1) \psi_{n-1} dq \\
 (3.185) \Rightarrow &= \frac{|A_n|^2}{|A_{n-1}|^2} \int \psi_{n-1}^* \left(\frac{1}{\hbar\omega} \hat{H} + \frac{1}{2} \right) \psi_{n-1} dq \\
 (3.197), (3.198) \Rightarrow &= \frac{|A_n|^2}{|A_{n-1}|^2} \left(n - 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right) \\
 &= n \frac{|A_n|^2}{|A_{n-1}|^2}.
 \end{aligned}$$

Обравши фазовий множник рівним 1 (оскільки загальна фаза не суттєва), отримаємо

$$\begin{aligned}
 (3.199) \Rightarrow &A_n = \frac{1}{\sqrt{n}} A_{n-1} \\
 (3.199) \Rightarrow &= \frac{1}{\sqrt{n}} \frac{1}{\sqrt{n-1}} A_{n-2} \\
 &\dots \tag{3.200} \\
 (3.199) \Rightarrow &= \frac{A_0}{\sqrt{n!}} \\
 (3.198) \Rightarrow &= \frac{1}{\sqrt{n!}}.
 \end{aligned}$$

Остаточно, підставивши (3.200) в (3.198), знайдемо

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n \psi_0. \tag{3.201}$$

3.7. Гармонічний осцилятор: формалізм операторів народження та знищення 89

Явний вигляд функцій ψ_n можна встановити, підставивши явний вигляд оператора \hat{a}^\dagger з (3.183) у координатному представленні в (3.201):

$$\begin{aligned}
 (3.183), (3.201) \Rightarrow \quad \psi_n &= \frac{1}{\sqrt{n!2^n}} (y - \partial_y)^n \psi_0 \\
 (3.196) \Rightarrow \quad &= \frac{1}{\sqrt{n!2^n}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} (y - \partial_y)^n e^{-y^2/2} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{n!2^n}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-y^2/2} H_n(y) \\
 (3.181) \Rightarrow \quad &= \frac{1}{\sqrt{n!2^n}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right), \\
 &\hspace{15em} (3.202)
 \end{aligned}$$

де H_n — поліноми Чебишева-Ерміта

$$\begin{aligned}
 H_n(y) &= e^{y^2/2} (y - \partial_y)^n e^{-y^2/2} \\
 &= e^{y^2} (-1)^n \partial_y^n e^{-y^2}.
 \end{aligned} \tag{3.203}$$

3.8 Обчислення матричних елементів операторів \hat{a}^\dagger, \hat{a} та їх комбінацій

3.8.1 Оператор числа частинок \hat{N}

Задача 97. З'ясувати, чи відповідає оператор числа частинок

$$\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}. \quad (3.204)$$

спостережуваний.

Розв'язок.

$$\begin{aligned} (3.204) \Rightarrow \hat{N}^\dagger &= (\hat{a}^\dagger \hat{a})^\dagger \\ &= \hat{a}^\dagger (\hat{a}^\dagger)^\dagger \\ (3.177) \Rightarrow &= \hat{a}^\dagger \hat{a} \\ (3.204) \Rightarrow &= \hat{N}. \end{aligned} \quad (3.205)$$

Отже, оператор числа частинок є ермітовим, а тому йому відповідає спостережувана.

Задача 98. З'ясувати фізичний зміст оператора числа частинок \hat{N} .

Розв'язок.

Випишемо середнє значення енергії $\langle \hat{H} \rangle_n$ у стані n :

$$\begin{aligned} E_n \equiv \langle \hat{H} \rangle_n &= \int \psi_n^* \hat{H} \psi_n dq \\ (3.186) \Rightarrow &= \int \psi_n^* \hbar \omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \psi_n dq \\ (3.198) \Rightarrow &= \hbar \omega \int \psi_n^* \hat{a}^\dagger \hat{a} \psi_n dq + \frac{\hbar \omega}{2} \\ (3.197) \Rightarrow &= \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \\ \Rightarrow &\int \psi_n^* \hat{a}^\dagger \hat{a} \psi_n dq = n. \end{aligned} \quad (3.206)$$

Тоді

$$\begin{aligned} \langle \hat{N} \rangle_n &= \int \psi_n^* \hat{N} \psi_n dq \\ (3.204) \Rightarrow &= \int \psi_n^* \hat{a}^\dagger \hat{a} \psi_n dq \\ (3.206) \Rightarrow &= n. \end{aligned} \quad (3.207)$$

3.8. Обчислення матричних елементів операторів \hat{A}^\dagger , \hat{A} та їх комбінацій 91

Як видно з (3.207), середнє від оператора $\langle \hat{N} \rangle_n$ у стані ψ_n рівне кількості квантів (частинок) n з енергією $\hbar\omega$.

Задача 99. Знайти власні функції та власні значення оператора \hat{N} .

Розв'язок.

Гамільтоніан \hat{H} можна виразити через оператор \hat{N} , зокрема

$$(3.185), (3.204) \Rightarrow \hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right). \quad (3.208)$$

Примітка. Як випливає з (3.208), квантовий гармонічний осцилятор можна інтерпретувати як набір квантів (частинок) з енергією $\hbar\omega$. Дані частинки **не взаємодіють між собою**, оскільки гамільтоніан являє собою просту суму квантів: у ньому відсутні перехресні члени, які були б відповідальні за міжчастинкову взаємодію. При цьому основний стан, коли $n = 0$, відповідає відсутності частинок, тобто основний стан описує **вакуумний стан**. Енергія вакууму при цьому рівна $\frac{\hbar\omega}{2} \neq 0$.

Знайдемо комутатор $[\hat{H}, \hat{N}]$:

$$\begin{aligned} (3.208) \Rightarrow [\hat{H}, \hat{N}] &= \hbar\omega \left[\left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right), \hat{N} \right] \\ &= \hbar\omega [\hat{N}, \hat{N}] + \hbar\omega \left[\frac{1}{2}, \hat{N} \right] \\ &= 0. \end{aligned} \quad (3.209)$$

Оскільки оператори \hat{N} та \hat{H} комутують, то для них існує спільний базис власних функцій.

Знайдемо матричний елемент H_{kn} гамільтоніана:

$$\begin{aligned} (3.197) \Rightarrow H_{kn} &= \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \delta_{kn} = \int \psi_k^* \hat{H} \psi_n dq \\ (3.208) \Rightarrow &= \hbar\omega N_{kn} + \frac{\hbar\omega}{2} \delta_{kn} \\ \Rightarrow N_{kn} &= \int \psi_k^* \hat{N} \psi_n dq = n \delta_{kn}, \end{aligned} \quad (3.210)$$

де використано, що власні функції оператора \hat{H} ортогональні, δ_{kn} — символ δ -Кroneкера. Останній рядок виконується лише за умови, якщо

$$\hat{N} \psi_n = n \psi_n. \quad (3.211)$$

З (3.211) випливає, що для оператора \hat{N} :

- власними функціями є ψ_n з (3.202)
- власними значеннями є кількість квантів (частинок) n .

3.8.2 Дія операторів \hat{a}^\dagger, \hat{a} на стани осцилятора ψ_n

Задача 100. Визначити дію операторів народження \hat{a}^\dagger та знищення \hat{a} на хвильові функції гармонічного осцилятора ψ_n .

Розв'язок.

З (3.201) для функції ψ_{n+1} маємо:

$$\begin{aligned}
 (3.201) \Rightarrow \psi_{n+1} &= \frac{1}{\sqrt{(n+1)!}} (\hat{a}^\dagger)^{n+1} \psi_0 \\
 &= \frac{1}{\sqrt{n+1}} \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a}^\dagger (\hat{a}^\dagger)^n \psi_0 \\
 &= \frac{1}{\sqrt{n+1}} \hat{a}^\dagger \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n \psi_0 \\
 (3.201) \Rightarrow &= \frac{1}{\sqrt{n+1}} \hat{a}^\dagger \psi_n,
 \end{aligned} \tag{3.212}$$

звідки

$$\hat{a}^\dagger \psi_n = \sqrt{n+1} \psi_{n+1}. \tag{3.213}$$

Для ψ_{n-1} маємо:

$$\begin{aligned}
 (3.211) \Rightarrow (n-1) \psi_{n-1} &= \hat{N} \psi_{n-1} \\
 (3.204) \Rightarrow &= \hat{a}^\dagger \hat{a} \psi_{n-1} \\
 (3.178) \Rightarrow &= \hat{a} \hat{a}^\dagger \psi_{n-1} - \psi_{n-1} \\
 (3.212) \Rightarrow &= \sqrt{n} \hat{a} \psi_n - \psi_{n-1},
 \end{aligned} \tag{3.214}$$

звідки

$$\hat{a} \psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1}. \tag{3.215}$$

Примітка. Ввівши **позначення Дірака** $|n\rangle \equiv \psi_n$, вирази (3.213) та (3.215) можна переписати в еквівалентному вигляді:

$$\begin{aligned}
 \hat{a}^\dagger |n\rangle &= \sqrt{n+1} |n+1\rangle \\
 \hat{a} |n\rangle &= \sqrt{n} |n-1\rangle.
 \end{aligned} \tag{3.216}$$

Визначені правила дії (3.213) і (3.215) або тотожні їм (3.216) операторів народження \hat{a}^\dagger і знищення \hat{a} на стани осцилятора дозволяють швидко та ефективно обчислювати матричні елементи різноманітних операторів. Зокрема, позначення Дірака дозволяють суттєво скоротити час за записування матричних елементів. Приміром, співвідношення ортогональності для станів осцилятора записується як

$$\int \psi_k^* \psi_n dq \equiv \langle k | n \rangle = \delta_{kn}. \tag{3.217}$$

3.8. Обчислення матричних елементів операторів \hat{A}^\dagger , \hat{A} та їх комбінацій 93

3.8.3 Обчислення середніх

Задача 101. Обчислити середнє значення для оператора координати \hat{x} у n -му стані осцилятора.

Розв'язок.

$$\begin{aligned}\langle \hat{x} \rangle_n &= \int \psi_n^* \hat{x} \psi_n dx \\ &\equiv \langle n | \hat{x} | n \rangle \\ (3.181) \Rightarrow &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \langle n | \hat{y} | n \rangle \\ (3.184) \Rightarrow &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle n | (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) | n \rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\langle n | \hat{a} | n \rangle + \langle n | \hat{a}^\dagger | n \rangle) \\ (3.216) \Rightarrow &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n} \langle n | n-1 \rangle + \sqrt{n+1} \langle n | n+1 \rangle) \\ (3.217) \Rightarrow &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n} \cdot 0 + \sqrt{n+1} \cdot 0) \\ &= 0.\end{aligned}\tag{3.218}$$

Задача 102. Обчислити середнє значення для оператора \hat{x}^2 у n -му стані осцилятора.

Розв'язок.

$$\begin{aligned}
& \langle \hat{x}^2 \rangle_n = \langle n | \hat{x}^2 | n \rangle \\
(3.181) \Rightarrow & = \frac{\hbar}{m\omega} \langle n | \hat{y}^2 | n \rangle \\
(3.184) \Rightarrow & = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n | (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 | n \rangle \\
& = \frac{\hbar}{2m\omega} \left(\langle n | \hat{a}\hat{a} | n \rangle + \langle n | \hat{a}\hat{a}^\dagger | n \rangle \right. \\
& \quad \left. + \langle n | \hat{a}^\dagger\hat{a} | n \rangle + \langle n | \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger | n \rangle \right) \\
(3.216) & = \frac{\hbar}{2m\omega} \left[\sqrt{n}\sqrt{n-1} \langle n | n-2 \rangle + (n+1) \langle n | n \rangle \right. \\
& \quad \left. + n \langle n | n \rangle + \sqrt{n+1}\sqrt{n+2} \langle n | n+2 \rangle \right] \\
(3.217) \Rightarrow & = \frac{\hbar}{2m\omega} \left[\sqrt{n}\sqrt{n-1} \cdot 0 + (n+1) \right. \\
& \quad \left. + n + \sqrt{n+1}\sqrt{n+2} \cdot 0 \right] \\
& = \frac{\hbar}{2m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right).
\end{aligned} \tag{3.219}$$

Задача 103. Знайти середнє значення оператора імпульсу \hat{p} у стані осцилятора $|n\rangle$.

Розв'язок.

$$\begin{aligned}
& \langle \hat{p} \rangle_n = \langle n | \hat{p} | n \rangle \\
(3.182) \Rightarrow & = -i\sqrt{m\hbar\omega} \langle n | \partial_y | n \rangle \\
(3.184) \Rightarrow & = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \langle n | (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) | n \rangle \\
(3.216) \Rightarrow & = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \left(\sqrt{n+1} \langle n | n+1 \rangle - \sqrt{n} \langle n | n-1 \rangle \right) \\
& = 0.
\end{aligned} \tag{3.220}$$

Задача 104. Обчислити середнє значення оператора \hat{p}^2 у n -му стані осцилятора.

Задача 105. Обчислити середнє значення оператора \hat{x}^3 у стані осцилятора $|n\rangle$.

Задача 106. Обчислити середнє значення оператора $\hat{A} = \alpha\hat{x}^2 + \beta\hat{p}^3$ у n -му стані осцилятора.

3.8. Обчислення матричних елементів операторів \hat{A}^\dagger , \hat{A} та їх комбінацій 95

Задача 107. Обчислити середнє значення оператора $\hat{a}\hat{p}^2$ у стані осцилятора $|n\rangle$.

Розділ 4

Проходження та відбивання на бар'єрах

4.1 Бар'єри

Задача 108. Обчислити потік густини імовірності j для частинки маси m , яка визначається станом

$$\psi(x) = Ae^{ikx}. \quad (4.1)$$

Розв'язок.

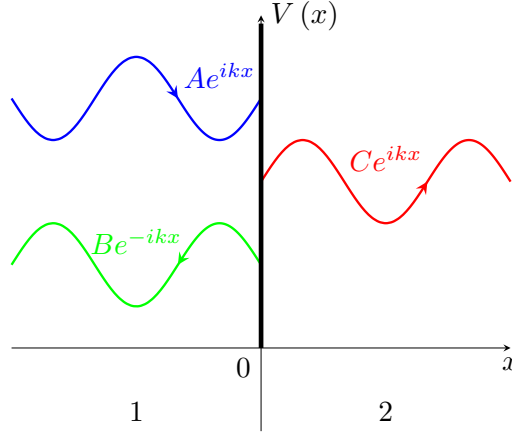
$$\begin{aligned} (2.5) \Rightarrow j &= i \frac{\hbar}{2m} (\psi \partial_x \psi^* - \psi^* \partial_x \psi) \\ (4.1) \Rightarrow &= i \frac{\hbar}{2m} (Ae^{ikx} \partial_x A^* e^{-ikx} - A^* e^{-ikx} \partial_x A e^{ikx}) \\ (1.6) \Rightarrow &= i \frac{\hbar}{2m} |A|^2 (e^{ikx} \partial_x e^{-ikx} - e^{-ikx} \partial_x e^{ikx}) \\ &= i \frac{\hbar}{2m} |A|^2 (-ik - ik) \\ &= \frac{\hbar k}{m} |A|^2. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Задача 109. Знайти хвильову функцію частинки маси m , яка проходить крізь δ -потенціал

$$V(x) = \alpha \delta(x). \quad (4.3)$$

Розв'язок.

Оскільки потенціальний бар'єр є δ -подібним, тобто дорівнює нулю всюди

Рис. 4.1: Проходження частинки крізь δ -бар'єр

за винятком точки $x = 0$, то стан частинки до та після проходження бар'єру описується лінійною комбінацією плоских хвиль:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0 \\ Ce^{ikx} + De^{-ikx}, & x > 0. \end{cases} \quad (4.4)$$

Без втрати загальності надалі вважатимемо, що налітаюча частинка падає на δ -подібний бар'єр зліва направо, див. Рис. 4.1. Це означає, що амплітуда D у виразі (4.4) дорівнює нулю: хвиля, як падає на бар'єр справа (і описується імпульсом $p = -\hbar k$), відсутня. Праворуч від бар'єра залишається лише та хвиля, яка пройшла (описується, відповідно, імпульсом $p = \hbar k$). Ліворуч від бар'єра існують як падаюча, так і відбита хвилі.

Таким чином, хвильова функція має вигляд

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0 \\ Ce^{ikx}, & x > 0. \end{cases} \quad (4.5)$$

Тоді з умови неперервності хвильової функції отримуємо

$$\begin{aligned} \psi(0_-) &= \psi(0_+) \\ (4.5) \Rightarrow A + B &= C, \end{aligned} \quad (4.6)$$

де 0_- та 0_+ позначають області, як зазвичай близькі до точки $x = 0$ зліва та справа відповідно.

Проінтегрувавши стаціонарне рівняння Шредінгера з δ -потенціалом (4.3) в інтервалі $x \in [-\varepsilon, \varepsilon]$ та взявши $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0}$ аналогічно тому, як було зроблено в **Задачі 86** у викладці (3.30), знаходимо розрив похідної

хвильової функції в точці $x = 0$:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m} [\psi'(0_+) - \psi'(0_-)] &= \alpha\psi(0) \\ (4.5) \Rightarrow ik \frac{\hbar^2}{2m} (C - A + B) &= \alpha C \\ \Rightarrow -A + B &= -(1 + i\kappa) C, \end{aligned} \quad (4.7)$$

де

$$\kappa = \frac{2m\alpha}{\hbar^2 k}. \quad (4.8)$$

З (4.6) і (4.7) отримуємо однорідну СЛАР 3-го порядку

$$\begin{cases} A + B - C = 0 \\ -A + B + (1 + i\kappa) C = 0. \end{cases} \quad (4.9)$$

Обравши в якості параметричної змінної амплітуду A , знаходимо розв'язки СЛАР (4.9)

$$\begin{aligned} B &= -\frac{i\kappa}{2 + i\kappa} A \\ C &= \frac{2}{2 + i\kappa} A. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Таким чином, **хвильова функція частинки, яка проходить крізь δ -бар'єр**, має вигляд

$$(4.5), (4.10) \Rightarrow \psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} - \frac{i\kappa}{2+i\kappa} Ae^{-ikx}, & x < 0 \\ \frac{2}{2+i\kappa} Ae^{ikx}, & x > 0, \end{cases} \quad (4.11)$$

де величина κ визначається виразом (4.8).

Задача 110. Знайти хвильову функцію частинки маси m , яка проходить над δ -бар'єром

$$V(x) = -\alpha\delta(x). \quad (4.12)$$

Яка природа наявності доданку $\propto e^{-ikx}$ (явище **надбар'єрного відбиття**) в отриманому виразі?

Задача 111. Розрахувати потоки густини імовірності для частинки маси m , яка проходить крізь δ -бар'єр $V(x) = \alpha\delta(x)$.

Розв'язок.

Вектор стану частинки, яка проходить крізь δ -бар'єр, було знайдено в

Задачі 109. Зокрема, зі структури хвильової функції, див. (4.11) та Рис. 4.1, видно, що вона містить декілька складових, а саме:

- налітаючу (падаючу) хвилю, яка визначається доданком $\propto e^{ikx}$ в області $x < 0$ – зображена синім кольором
- відбиту хвилю, яка визначається вкладом $\propto e^{-ikx}$ в області $x < 0$ – показана зеленим кольором
- хвилю, яка пройшла; описується доданком $\propto e^{ikx}$ в області $x > 0$ – зображена червоним кольором.

Кожна з цих хвиль визначає відповідний потік густини імовірності, розрахунок якого проводиться повністю аналогічно до **Задачі 108**, див. (4.2):

$$\begin{aligned} j_0 &= \frac{\hbar k}{m} |A|^2 \\ j_{\mathcal{R}} &= -\frac{\hbar k}{m} |A|^2 \frac{m^2 \alpha^2}{\hbar^4 k^2 + m^2 \alpha^2} \\ j_{\mathcal{T}} &= \frac{\hbar k}{m} |A|^2 \frac{\hbar^4 k^2}{\hbar^4 k^2 + m^2 \alpha^2}, \end{aligned} \quad (4.13)$$

де враховано (4.8); j_0 позначає падаючий потік; $j_{\mathcal{R}}$ – відбитий; $j_{\mathcal{T}}$ – потік, який пройшов крізь δ -бар'єр.

Примітки:

1. Потік $j_{\mathcal{R}}$ дає від'ємний вклад, оскільки він спрямований у бік, протилежний до налітаючого потоку j_0
2. Відмінність від нуля потоку справа від δ -бар'єру означає, що квантова частинка проходить крізь бар'єр. Це **є суто квантовим ефектом** та має хвильову природу. Аналогічне явище спостерігається у хвильовій оптиці: якщо довжина хвилі більша за товщину дзеркала, то хвиля проходить крізь бар'єр. З точки ж зору класичної фізики, частинка не може подолати δ -потенціал, оскільки його висота є нескінченною.
3. Як можна бачити з (4.13), сумарний потік зліва та справа від бар'єру є однаковим:

$$(4.13) \Rightarrow j_0 + j_{\mathcal{R}} = j_{\mathcal{T}}, \quad (4.14)$$

тобто під час проходження бар'єру **потік густини імовірності зберігається**. Це є наслідком неперервності (збереження) потоку.

Задача 112. Обчислити коефіцієнти відбиття та проходження для частинки маси m , яка проходить крізь δ -бар'єр $V = \alpha \delta(x)$.

Розв'язок.

Коефіцієнт відбиття \mathcal{R} визначається як

$$\begin{aligned} \mathcal{R} &= \frac{|j_{\mathcal{R}}|}{|j_0|} \\ (4.13) \Rightarrow &= \frac{m^2 \alpha^2}{\hbar^4 k^2 + m^2 \alpha^2}. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Аналогічно для коефіцієнта проходження \mathcal{T} маємо

$$\begin{aligned} \mathcal{T} &= \frac{|j_{\mathcal{T}}|}{|j_0|} \\ (4.13) \Rightarrow &= \frac{\hbar^4 k^2}{\hbar^4 k^2 + m^2 \alpha^2}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Для суми цих коефіцієнтів маємо

$$\begin{aligned} (4.15), (4.16) \Rightarrow \quad \mathcal{R} + \mathcal{T} &= \frac{m^2 \alpha^2}{\hbar^4 k^2 + m^2 \alpha^2} + \frac{\hbar^4 k^2}{\hbar^4 k^2 + m^2 \alpha^2} \\ &= 1, \end{aligned} \quad (4.17)$$

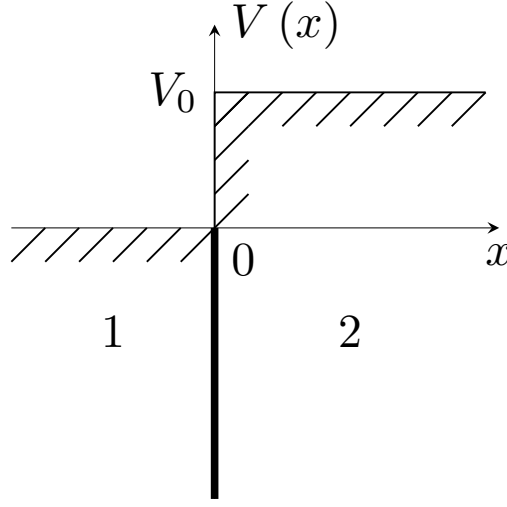
як і повинно бути. Це є наслідком збереження потоку, див. (4.14).

Задача 113. Обчислити коефіцієнти відбиття \mathcal{R} та проходження \mathcal{T} для частинки маси m , яка пролітає над δ -бар'єром $V = -\alpha \delta(x)$. Яка причина того, що в даному випадку коефіцієнт проходження $\mathcal{T} < 1$?

Задача 114. Знайти хвильову функцію частинки маси m , яка налітає зліва на бар'єр

$$V(x) = V_0 \theta(x) - \frac{\hbar^2}{2m} \alpha \delta(x), \quad (4.18)$$

де $\theta(x)$ – θ -функція Хевісайда, див. Рис. 4.2. Енергію частинки вважати додатною, $E > 0$.

Рис. 4.2: δ -яма зі сходинкоюРозв'язок.

Виходячи зі структури потенціалу (4.18), можна виділити дві області, див. Рис. 4.2. У кожній із цих областей стаціонарне рівняння Шредінгера матиме свої власні функції, див. **Задачу 77**. Зокрема:

$$\begin{aligned}
 x < 0: \Rightarrow \quad & -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \psi_1(x) = E \psi_1(x) \\
 & \psi_1(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \\
 x < 0: \Rightarrow \quad & \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V_0 \right) \psi_2(x) = E \psi_2(x) \\
 & \psi_2(x) = C e^{iqx},
 \end{aligned} \tag{4.19}$$

де

$$\begin{aligned}
 k &= \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \\
 q &= \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}.
 \end{aligned} \tag{4.20}$$

У (4.19) вже враховано, що в області $x > 0$, згідно з умовою задачі, відбита хвиля відсутня внаслідок закону збереження імпульсу.

З умови неперервності хвильової функції в точці $x = 0$ маємо:

$$\begin{aligned}
 \psi_1(0) &= \psi_2(0) \\
 (4.19) \Rightarrow \quad & A + B = C.
 \end{aligned} \tag{4.21}$$

Проінтегрувавши рівняння Шредінгера в інтервалі $x \in [-\varepsilon, \varepsilon]$, $\varepsilon \rightarrow 0$, див. **Задачу 86** (3.30), отримуємо

$$\begin{aligned} (3.30), (4.18) &\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} [\psi_2'(0) - \psi_1'(0)] - \frac{\hbar^2}{2m} \alpha \psi(0) = 0 \\ (4.19) &\Rightarrow ik(A - B) - iqC = \alpha C \quad (4.22) \\ &\quad A - B = \frac{q - i\alpha}{k} C. \end{aligned}$$

Отже, маємо однорідну СЛАР 3-го порядку відносно невідомих амплітуд A, B, C :

$$\begin{aligned} (4.21), (4.22) &\Rightarrow \begin{cases} A + B - C = 0 \\ A - B - \frac{q - i\alpha}{k} C = 0 \end{cases} \\ &\Rightarrow \begin{cases} B = \frac{k - q + i\alpha}{k + q - i\alpha} A \\ C = \frac{2k}{k + q - i\alpha} A. \end{cases} \quad (4.23) \end{aligned}$$

Остаточно, шукана хвильова функція приймає вигляд

$$(4.19), (4.23) \Rightarrow \psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + \frac{k - q + i\alpha}{k + q - i\alpha} Ae^{-ikx}, & x < 0 \\ \frac{2k}{k + q - i\alpha} Ae^{iqx}, & x > 0, \end{cases} \quad (4.24)$$

де хвильові вектори k і q визначаються (4.20).

Задача 115. Знайти хвильову функцію частинки маси m , яка налітає зліва на бар'єр (4.18), для випадку від'ємних енергій, $E < 0$.

Задача 116. Знайти коефіцієнти відбиття \mathcal{R} та проходження \mathcal{T} для частинки маси m , яка пролітає над бар'єром (4.18). Вважати, що енергія частинки додатня, $E > 0$.

Розділ 5

Момент кількості руху

5.1 Власні функції та значення оператора моменту кількості руху

5.1.1 Оператор моменту кількості руху та його квадрат

Оператор моменту кількості руху $\hat{\vec{J}}$ — це оператор, який відповідає спостережуваній моменту кількості руху. Звідси слідує, що він є ермітовим,

$$\hat{\vec{J}}^\dagger = \hat{\vec{J}}. \quad (5.1)$$

Розмірність моменту рівна \hbar . Для спрощення виразів надалі вважатимемо $\hat{\vec{J}}$ безрозмірним, тобто момент кількості руху вимірюватимемо в одиницях \hbar . Щоб перейти до розмірних величин у викладках нижче, оператор $\hat{\vec{J}}$ необхідно помножити на \hbar .

Для компонент оператора $\hat{\vec{J}}$ виконуються наступні комутаційні співвідношення:

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{J}_k, \quad (5.2)$$

де ε_{ijk} — символ Леві-Чивіті. У покомпонентному вигляді (5.2) матиме вигляд

$$\begin{aligned} [\hat{J}_x, \hat{J}_y] &= i\hat{J}_z \\ [\hat{J}_y, \hat{J}_z] &= i\hat{J}_x \\ [\hat{J}_z, \hat{J}_x] &= i\hat{J}_y. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Оператор квадрата моменту кількості руху $\hat{\vec{J}}^2$ визначається як

$$\begin{aligned}\hat{\vec{J}}^2 &= \hat{\vec{J}} \cdot \hat{\vec{J}} \\ &= \hat{J}_i \hat{J}_i \\ &= \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2,\end{aligned}\tag{5.4}$$

де у другому рядку для скорочення вжито стандартне правило: по індексах, що повторюються, ведеться підсумовування.

Задача 117. Показати, що

$$\left[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_j \right] = 0, \quad j = \overline{1, 3}.\tag{5.5}$$

Розв'язок.

$$\begin{aligned}(5.4) \Rightarrow \quad & \left[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_j \right] = \left[\hat{J}_i \hat{J}_i, \hat{J}_j \right] \\ \left| \begin{aligned} \left[\hat{A} \hat{B}, \hat{C} \right] &= \hat{A} \left[\hat{B}, \hat{C} \right] \\ &+ \left[\hat{A}, \hat{C} \right] \hat{B} \end{aligned} \right| \Rightarrow &= \left(\hat{J}_i \left[\hat{J}_i, \hat{J}_j \right] + \left[\hat{J}_i, \hat{J}_j \right] \hat{J}_i \right) \\ (5.2) \Rightarrow &= i\varepsilon_{ijk} \hat{J}_i \hat{J}_k + i\varepsilon_{ijk} \hat{J}_k \hat{J}_i \\ &= i\varepsilon_{ijk} \left(\hat{J}_i \hat{J}_k + \hat{J}_k \hat{J}_i \right) \\ &= 0,\end{aligned}\tag{5.6}$$

де в останньому рядку використано, що

$$\forall A_{ik}: A_{ik} = A_{ki}, \quad \varepsilon_{ijk} A_{ik} = 0.\tag{5.7}$$

5.1.2 \hat{J}_z та оператор квадрата моменту: спільний базис

Оскільки будь-яка компонента \hat{J}_i комутує з $\hat{\vec{J}}^2$, то для них можна побудувати спільний базис, в якому середні $\langle \hat{J}_i \rangle, \langle \hat{\vec{J}}^2 \rangle$ матимуть певні значення.

Виберемо $\hat{J}_i = \hat{J}_z$ — проекцію моменту кількості руху на вісь Oz (вісь квантування). Спільний базис операторів \hat{J}_z та $\hat{\vec{J}}^2$ позначимо як $\{|jm\rangle\}$, причому його можна обрати так, щоб

$$\langle jm | j'm' \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'}.\tag{5.8}$$

Оскільки базис є повним, то довільну функцію в просторі моментів кількості руху можна розкласти за цим базисом.

Власні значення оператора \hat{J}_z позначимо як m , тобто

$$\hat{J}_z |jm\rangle = m |jm\rangle. \quad (5.9)$$

Власні значення оператора \hat{J}^2 позначимо як λ_j , тобто

$$\hat{J}^2 |jm\rangle = \lambda_j |jm\rangle. \quad (5.10)$$

Примітка. Обраний базис $\{|jm\rangle\}$ не містить власних функцій та власних значень операторів \hat{J}_x та \hat{J}_y : як видно з (5.2) або з (5.3), вони не комутують з \hat{J}_z . В якості осі квантування можна обрати будь-яку іншу компоненту (\hat{J}_x або \hat{J}_y), та визначати базис відносно нового набору операторів ($\{\hat{J}_x, \hat{J}^2\}$ та $\{\hat{J}_y, \hat{J}^2\}$ відповідно). Це нічого не змінить, оскільки єдиний критерій вибору базису в просторі Гільберта — повнота базису.

Задача 118. Показати, що спектр власних значень оператора \hat{J}_z є обмеженим.

Розв'язок.

Запишемо середнє $\langle \hat{J}^2 \rangle$ на його власних функціях:

$$\begin{aligned} (5.10), (5.8) &\Rightarrow \lambda_j = \langle jm | \hat{J}^2 | jm \rangle \\ (5.4) &\Rightarrow = \langle jm | \hat{J}_x^2 | jm \rangle + \langle jm | \hat{J}_y^2 | jm \rangle \\ &\quad + \langle jm | \hat{J}_z^2 | jm \rangle \\ (5.9), (5.8) &\Rightarrow = \langle jm | \hat{J}_x^2 | jm \rangle + \langle jm | \hat{J}_y^2 | jm \rangle + m^2 \\ &\Rightarrow \lambda_j - m^2 = \langle jm | \hat{J}_x^2 | jm \rangle + \langle jm | \hat{J}_y^2 | jm \rangle \\ &\quad \geq 0 \\ &\Rightarrow \lambda_j - m^2 \geq 0, \end{aligned} \quad (5.11)$$

звідки

$$m_{\min} \leq m \leq m_{\max}, \quad (5.12)$$

де

$$\begin{aligned} m_{\min} &\geq -\sqrt{\lambda_j} \\ m_{\max} &\leq \sqrt{\lambda_j}, \end{aligned} \quad (5.13)$$

що й треба було довести.

5.1.3 Сходинкові оператори \hat{J}_+ та \hat{J}_-

Введемо наступні оператори:

$$\begin{aligned}\hat{J}_+ &= \hat{J}_x + i\hat{J}_y \\ \hat{J}_- &= \hat{J}_x - i\hat{J}_y.\end{aligned}\tag{5.14}$$

Задача 119. Показати, що

$$\left[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_+\right] = 0.\tag{5.15}$$

Розв'язок.

$$\begin{aligned}(5.14) \Rightarrow \left[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_+\right] &= \left[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_x + i\hat{J}_y\right] \\ &= \left[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_x\right] + i\left[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_y\right] \\ (5.5) \Rightarrow &= 0.\end{aligned}\tag{5.16}$$

Задача 120. Показати, що

$$\left[\hat{J}_z, \hat{J}_+\right] = \hat{J}_+.\tag{5.17}$$

Розв'язок.

$$\begin{aligned}(5.14) \Rightarrow \left[\hat{J}_z, \hat{J}_+\right] &= \left[\hat{J}_z, \hat{J}_x + i\hat{J}_y\right] \\ &= \left[\hat{J}_z, \hat{J}_x\right] + i\left[\hat{J}_z, \hat{J}_y\right] \\ (5.3) \Rightarrow &= i\hat{J}_y + i(-i\hat{J}_x) \\ &= i\hat{J}_y + \hat{J}_x \\ (5.14) \Rightarrow &= \hat{J}_+.\end{aligned}\tag{5.18}$$

Задача 121. Показати, що

$$\hat{\vec{J}}^2 = \hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_z^2 - \hat{J}_z.\tag{5.19}$$

Розв'язок.

$$\begin{aligned}
 (5.14) \Rightarrow \quad \hat{J}_+ \hat{J}_- &= (\hat{J}_x + i\hat{J}_y)(\hat{J}_x - i\hat{J}_y) \\
 &= \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + i(\hat{J}_y \hat{J}_x - \hat{J}_x \hat{J}_y) \\
 (5.3) \Rightarrow \quad &= \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + i(-i\hat{J}_z) \\
 &= \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z \\
 \Rightarrow \quad \hat{J}_+ \hat{J}_- - \hat{J}_z &= \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 \\
 (5.4) \Rightarrow \quad &= \hat{\vec{J}}^2 - \hat{J}_z^2,
 \end{aligned} \tag{5.20}$$

що й треба було довести.

Задача 122. Показати, що

$$[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_-] = 0. \tag{5.21}$$

Задача 123. Показати, що

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_-] = -\hat{J}_-. \tag{5.22}$$

Задача 124. Показати, що

$$\hat{\vec{J}}^2 = \hat{J}_- \hat{J}_+ + \hat{J}_z^2 + \hat{J}_z. \tag{5.23}$$

5.1.4 Сходинкові оператори \hat{J}_+ та \hat{J}_- : дія на $|jm\rangle$

Задача 125. Показати, що

$$\hat{J}_+ |jm\rangle = c_+ |j, m+1\rangle, \quad c_+ = \text{const.} \tag{5.24}$$

Розв'язок.

Розглянемо дію комутатора $[\hat{J}_z, \hat{J}_+]$ на стан $|jm\rangle$:

$$\begin{aligned}
 (5.17) \Rightarrow \quad \hat{J}_+ |jm\rangle &= [\hat{J}_z, \hat{J}_+] |jm\rangle \\
 &= (\hat{J}_z \hat{J}_+ - \hat{J}_+ \hat{J}_z) |jm\rangle \\
 &= \hat{J}_z \hat{J}_+ |jm\rangle - \hat{J}_+ \hat{J}_z |jm\rangle \\
 (5.9) \Rightarrow \quad &= \hat{J}_z \hat{J}_+ |jm\rangle - m \hat{J}_+ |jm\rangle \\
 \Rightarrow \quad \hat{J}_z \hat{J}_+ |jm\rangle &= (m+1) \hat{J}_+ |jm\rangle \\
 \left| |\zeta\rangle \equiv \hat{J}_+ |jm\rangle \right| \Rightarrow \quad \hat{J}_z |\zeta\rangle &= (m+1) |\zeta\rangle \\
 (5.9), (5.15), (5.21) \Leftrightarrow \quad |\zeta\rangle &\sim |j, m+1\rangle \\
 \left| |\zeta\rangle \equiv \hat{J}_+ |jm\rangle \right| \Rightarrow \quad \hat{J}_+ |jm\rangle &= c_+ |j, m+1\rangle, \quad c_+ = \text{const.}
 \end{aligned} \tag{5.25}$$

Задача 126. Показати, що

$$\hat{J}_- |jm\rangle = c_- |j, m-1\rangle, \quad c_- = \text{const.} \tag{5.26}$$

5.1.5 Сходинкові оператори \hat{J}_+ та \hat{J}_- : фізичний зміст

Задача 127. Показати, що

$$(\hat{J}_\pm)^\dagger = \hat{J}_\mp. \tag{5.27}$$

Розв'язок.

$$\begin{aligned}
 (5.14) \Rightarrow \quad (\hat{J}_\pm)^\dagger &= (\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)^\dagger \\
 &= \hat{J}_x^\dagger \pm (i\hat{J}_y)^\dagger \\
 &= \hat{J}_x^\dagger \mp i\hat{J}_y^\dagger \\
 (5.1) \Rightarrow \quad &= \hat{J}_x \mp i\hat{J}_y \\
 (5.14) \Rightarrow \quad &= \hat{J}_\mp.
 \end{aligned} \tag{5.28}$$

Фізичний зміст операторів \hat{J}_\pm :

- З (5.24), (5.26) випливає, що оператор \hat{J}_+ (\hat{J}_-) збільшує (зменшує) квантове число m на 1. Іншими словами, дані оператори **змінюють величину проекції моменту кількості руху на вісь квантування Oz** .

- З (5.27) випливає, що оператори \hat{J}_{\pm} не ермітові. Це означає, що їм **не відповідає жодна спостережувана** (як і операторам народження та знищення частинок).

Отже, ми отримали, що сходинокві оператори \hat{J}_{\pm} змінюють число m на дискретну величину, рівну 1. Разом з тим, з (5.12), (5.13) випливає обмеженість значень m . Це означає, що вектори $\hat{J}_{+}|jm_{\max}\rangle$ та $\hat{J}_{-}|jm_{\min}\rangle$ повинні лежати **за межами** гільбертового простору моменту кількості руху — інакше, враховуючи повноту базису векторів $\{|jm\rangle\}$, їх можна було б визначити в цьому базисі. Тобто

$$\begin{aligned} (5.13) \Rightarrow \quad m_{\max} \geq m' = m_{\max} + 1 &> m_{\max} \\ &\nexists m' \\ (5.13) \Rightarrow \quad m_{\min} \leq m'' = m_{\min} - 1 &< m_{\min} \\ &\nexists m''. \end{aligned} \quad (5.29)$$

Як слідує з (5.29), не існує m' та m'' . Тому можна покласти

$$\begin{aligned} \hat{J}_{+}|jm_{\max}\rangle &= 0 \\ \hat{J}_{-}|jm_{\min}\rangle &= 0. \end{aligned} \quad (5.30)$$

5.1.6 Спектр оператора квадрата моменту кількості руху

Задача 128. Для оператора \hat{J}^2 знайти явний вигляд власних значень λ_j .

Розв'язок.

Знайдемо $\hat{J}^2|jm_{\max}\rangle$:

$$\begin{aligned} (5.10) \Rightarrow \quad \lambda_j |jm_{\max}\rangle &= \hat{J}^2 |jm_{\max}\rangle \\ (5.23) \Rightarrow \quad &= (\hat{J}_{-}\hat{J}_{+} + \hat{J}_z^2 + \hat{J}_z) |jm_{\max}\rangle \\ (5.30) \Rightarrow \quad &= (\hat{J}_z^2 + \hat{J}_z) |jm_{\max}\rangle \\ (5.9) \Rightarrow \quad &= (m_{\max}^2 + m_{\max}) |jm_{\max}\rangle \\ \Leftrightarrow \quad \lambda_j &= m_{\max}(m_{\max} + 1). \end{aligned} \quad (5.31)$$

Аналогічно знайдемо $\hat{J}^2 |jm_{\min}\rangle$:

$$\begin{aligned}
 (5.10) \Rightarrow \lambda_j |jm_{\min}\rangle &= \hat{J}^2 |jm_{\min}\rangle \\
 (5.19) \Rightarrow &= \left(\hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_z^2 - \hat{J}_z \right) |jm_{\min}\rangle \\
 (5.30) \Rightarrow &= \left(\hat{J}_z^2 - \hat{J}_z \right) |jm_{\min}\rangle \\
 (5.9) \Rightarrow &= (m_{\min}^2 - m_{\min}) |jm_{\min}\rangle \\
 \Leftrightarrow &\lambda_j = m_{\min} (m_{\min} - 1).
 \end{aligned} \tag{5.32}$$

Тоді

$$\begin{aligned}
 (5.31) \Rightarrow m_{\max} (m_{\max} + 1) &= \lambda_j \\
 (5.32) \Rightarrow &= m_{\min} (m_{\min} - 1) \\
 \Rightarrow m_{\min} (m_{\min} - 1) &= m_{\max} (m_{\max} + 1) \\
 \Rightarrow m_{\min} &= \begin{bmatrix} m_{\max} + 1 \\ -m_{\max} \end{bmatrix} \\
 \left| m_{\min} \leq m_{\max} \right| \Rightarrow &m_{\min} = -m_{\max}.
 \end{aligned} \tag{5.33}$$

Як слідує з фізичних властивостей операторів \hat{J}_{\pm} , проекція $m_{\min} \leq m \leq m_{\max}$ змінюється дискретно з кроком 1 від m_{\min} до m_{\max} . Тому $m_{\max} - m_{\min} = n$ повинно бути цілим числом, що дає

$$\begin{aligned}
 m_{\max} - m_{\min} &= n, \quad n \in \mathbb{N} \\
 (5.33) \Rightarrow 2m_{\max} &= n, \quad n \in \mathbb{N}.
 \end{aligned} \tag{5.34}$$

Для простоти запису позначають $m_{\max} = j$. Тоді з (5.31), (5.10)

$$\lambda_j = j(j+1), \quad j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots \tag{5.35}$$

5.1.7 Власні значення та функції оператора кількості руху

Зібравши разом вирази (5.9), (5.10), (5.35), отримаємо:

$$\begin{aligned}
 \hat{J}^2 |jm\rangle &= j(j+1) |jm\rangle, \quad j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots \\
 \hat{J}_z |jm\rangle &= m |jm\rangle, \quad -j \leq m \leq j.
 \end{aligned} \tag{5.36}$$

Вирази (5.36) повністю визначають оператор кількості руху \hat{J} через:

- власні функції $|jm\rangle$
- власні значення $j(j+1)$ його квадрата \hat{J}^2
- власні значення m його проекції \hat{J}_z на вісь квантування Oz .

Множина станів $\{|jm\rangle\}$ з фіксованим значенням j називається **мультиплетом**. Кількість станів у мультиплеті, як слідує з (5.36), рівна $2j+1$.

Примітка. Наявність напівцілих значень j пов'язана з тим, що момент кількості руху в загальному випадку є сумою орбітального моменту імпульсу та власного моменту імпульсу частинки (**спіну**). Математично це записується як

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}, \quad (5.37)$$

де $\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$ — оператор кутового (орбітального) моменту (приймає **лише цілі** значення), \hat{S} — оператор спіну частинки (може приймати як цілі, так і напівцілі значення). Класичного аналогу спіну **не існує**.

5.1.8 Знаходження коефіцієнтів c_{\pm}

Задача 129. Показати, що

$$c_{+} = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}. \quad (5.38)$$

Розв'язок.

$$\begin{aligned} (5.24) \Rightarrow c_{+} |j, m+1\rangle &= \hat{J}_{+} |jm\rangle \\ |\bullet^{\dagger}| \Rightarrow c_{+}^{*} \langle j, m+1| &= \langle jm| \left(\hat{J}_{+} \right)^{\dagger} \\ (5.27) \Rightarrow &= \langle jm| \hat{J}_{-} \end{aligned} \quad (5.39)$$

Тоді для середнього значення $\langle jm | \hat{\vec{J}}^2 | jm \rangle$ у стані $|jm\rangle$ маємо:

$$\begin{aligned}
 (5.36), (5.8) &\Rightarrow j(j+1) = \langle jm | \hat{\vec{J}}^2 | jm \rangle \\
 (5.23) &\Rightarrow = \langle jm | \hat{J}_- \hat{J}_+ | jm \rangle \\
 &\quad + \langle jm | \hat{J}_z^2 | jm \rangle \\
 &\quad + \langle jm | \hat{J}_z | jm \rangle \\
 (5.36), (5.8) &\Rightarrow = \langle jm | \hat{J}_- \hat{J}_+ | jm \rangle + m(m+1) \\
 &\Rightarrow \langle jm | \hat{J}_- \hat{J}_+ | jm \rangle = j(j+1) - m(m+1) \\
 (5.24), (5.39), (5.8) &\Rightarrow |c_+|^2 = j(j+1) - m(m+1) \\
 &\quad c_+ = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}. \tag{5.40}
 \end{aligned}$$

Задача 130. Показати, що

$$c_- = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}. \tag{5.41}$$

Примітка. Використовуючи явний вигляд c_{\pm} з (5.38) та (5.41), можна об'єднати вирази (5.24) та (5.26) з виразами (5.30):

$$\begin{aligned}
 \hat{J}_+ |jm\rangle &= \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} |j, m+1\rangle \\
 \hat{J}_- |jm\rangle &= \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} |j, m-1\rangle. \tag{5.42}
 \end{aligned}$$

Очевидно, що (5.30) задовольняються автоматично, якщо підставити в (5.42) значення $m = m_{\max} = j$ та $m = m_{\min} = -j$.

5.1.9 Додавання моментів

Нехай є підсистеми 1 і 2, кожна з яких визначається оператором кількості руху $\hat{\vec{J}}_1$ і $\hat{\vec{J}}_2$ відповідно:

$$\begin{aligned}
 \hat{\vec{J}}_1^2 |j_1 m_1\rangle &= j_1(j_1+1) |j_1 m_1\rangle \\
 \hat{J}_{1z} |j_1 m_1\rangle &= m_1 |j_1 m_1\rangle \\
 \hat{\vec{J}}_2^2 |j_2 m_2\rangle &= j_2(j_2+1) |j_2 m_2\rangle \\
 \hat{J}_{2z} |j_2 m_2\rangle &= m_2 |j_2 m_2\rangle, \tag{5.43}
 \end{aligned}$$

де квантові числа j_1, m_1, j_2, m_2 та хвильові функції $|j_1 m_1\rangle, |j_2 m_2\rangle$ відомі.

Необхідно знайти момент кількості руху повної системи $\hat{\vec{J}}$. По аналогії з класичною механікою,

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{J}}_1 + \hat{\vec{J}}_2. \quad (5.44)$$

Для визначення оператора $\hat{\vec{J}}$ необхідно знайти множину власних значень його квадрата $\hat{\vec{J}}^2$ і його проекції на вісь квантування \hat{J}_z .

З (5.44) випливає, що

$$\hat{J}_z = \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}. \quad (5.45)$$

Представивши хвильову функцію системи як добуток хвильових функцій підсистем

$$|jm\rangle = |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle, \quad (5.46)$$

після підстановки в (5.45) отримаємо

$$\begin{aligned} m |jm\rangle &= \hat{J}_z |jm\rangle \\ (5.46) \Rightarrow &= \hat{J}_z |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle \\ (5.45) \Rightarrow &= (\hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}) |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle \\ (5.43) \Rightarrow &= (m_1 + m_2) |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle \\ (5.46) &= (m_1 + m_2) |jm\rangle. \end{aligned} \quad (5.47)$$

З (5.47)

$$m = m_1 + m_2. \quad (5.48)$$

Враховуючи (5.36), маємо

$$\begin{aligned} (5.48) \Rightarrow & m = m_1 + m_2 \\ (5.36) \Rightarrow & \leq j_1 + j_2, \end{aligned} \quad (5.49)$$

тобто

$$j \leq j_{\max} = j_1 + j_2. \quad (5.50)$$

Разом з тим, (5.50) визначає лише максимальне значення числа j . Вираз (5.44) є векторною сумою операторів, єдине обмеження на яку визначається виразами (5.45) та (5.48). Самі моменти можуть при цьому додаватися по-різному, і при цьому утворювати різні мультиплети з різними значеннями $j \leq j_{\max}$. Позначимо мінімальний мультиплет через j_{\min} . Тоді повна розмірність N (кількість лінійно незалежних векторів)

простору Гільберта всієї системи буде сумою розмірностей підпросторів відповідних мультиплетів, тобто

$$\begin{aligned}
 N &= \sum_{j=j_{\min}}^{j_{\max}} \sum_{m=-j}^j 1 \\
 &= \sum_{j=j_{\min}}^{j_{\max}} (2j+1) \\
 &= \frac{2j_{\min}+1+2j_{\max}+1}{2} (j_{\max}-j_{\min}+1) \\
 &= (j_{\max}+1+j_{\min})(j_{\max}+1-j_{\min}) \\
 &= (j_{\max}+1)^2 - j_{\min}^2.
 \end{aligned} \tag{5.51}$$

Оскільки розмірність простору не залежить від вибору базису, то розмірність простору Гільберта N всієї системи рівна також добутку розмірностей підпросторів підсистем 1 і 2, тобто

$$N = (2j_1+1)(2j_2+1). \tag{5.52}$$

В результаті маємо

$$\begin{aligned}
 (5.52) &\Rightarrow (2j_1+1)(2j_2+1) = N \\
 (5.51) &\Rightarrow &= (j_{\max}+1)^2 - j_{\min}^2 \\
 (5.50) &\Rightarrow &= (j_1+j_2+1)^2 - j_{\min}^2 \\
 &\Rightarrow &j_{\min}^2 = (j_1+j_2+1)^2 - (2j_1+1)(2j_2+1) \\
 &&= (j_1-j_2)^2 \\
 &\Rightarrow &j_{\min} = \pm |j_1-j_2| \\
 |j_{\min} \geq 0| &\Rightarrow &j_{\min} = |j_1-j_2|.
 \end{aligned} \tag{5.53}$$

Отже, **правило додавання моментів**: для системи, що складається з двох підсистем з операторами моменту \hat{J}_1 та \hat{J}_2 , повний момент \hat{J} визначається виразом (5.44); квантові числа такої системи змінюються в межах

$$\begin{aligned}
 |j_1-j_2| &\leq j \leq j_1+j_2 \\
 -j &\leq m \leq j.
 \end{aligned} \tag{5.54}$$

5.2. Матричний вигляд оператора моменту кількості руху та його власних функцій у випадку $J =$

5.2 Матричний вигляд оператора моменту кількості руху та його власних функцій у випадку $j = 1/2$

У випадку $j = 1/2$ (в одиницях \hbar) проекція моменту кількості руху m на вісь квантування може приймати 2 значення:

$$j = \frac{1}{2} \Rightarrow m = \left\{ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\}. \quad (5.55)$$

Базис $\{|jm\rangle\} \equiv \left| \frac{1}{2}, m \right\rangle$ тоді складається з двох функцій:

$$\left\{ \left| \frac{1}{2}, m \right\rangle \right\} \equiv \left\{ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right\}, \quad (5.56)$$

тобто розмірність простору (кількість лінійно незалежних векторів у просторі) Гільберта, який відповідає моменту кількості руху з $j = 1/2$, рівна 2.

Даний базис (5.56) є ортонормованим

$$\left\langle \frac{1}{2}, m \left| \frac{1}{2}, m' \right\rangle = \delta_{mm'}, \quad (5.57)$$

оскільки елементи базису є власними функціями ермітового оператора \hat{J}_z , що відповідають різним власним значенням:

$$\hat{J}_z \left| \frac{1}{2}, m \right\rangle = m \left| \frac{1}{2}, m \right\rangle. \quad (5.58)$$

Окрім того, як відомо,

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 \left| \frac{1}{2}, m \right\rangle &= j(j+1) \left| \frac{1}{2}, m \right\rangle \\ \left| j = \frac{1}{2} \right\rangle &\Rightarrow \quad = \frac{3}{4} \left| \frac{1}{2}, m \right\rangle. \end{aligned} \quad (5.59)$$

Оскільки розмірність простору Гільберта рівна 2, то довільний оператор \hat{A} , що визначений у просторі Гільберта з $j = 1/2$, можна представити у вигляді комплексної матриці 2×2 , зокрема

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \hat{A} \right| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle & \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \hat{A} \right| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| \hat{A} \right| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle & \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| \hat{A} \right| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{pmatrix}. \quad (5.60)$$

Вираз (5.60) називається **оператором \hat{A} у матричному вигляді**.

5.2.1 Матричний вигляд операторів \hat{J}_\pm

Задача 131. Знайти матричний вигляд оператора \hat{J}_+ у базисі (5.56).

Розв'язок.

Як відомо, дія оператора \hat{J}_+ на довільний вектор $|\frac{1}{2}, m\rangle$ визначається наступним виразом:

$$\begin{aligned} \hat{J}_+ \left| \frac{1}{2}, m \right\rangle &= \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \left| \frac{1}{2}, m+1 \right\rangle \\ \left| j = \frac{1}{2} \right\rangle \Rightarrow &= \sqrt{\frac{3}{4} - m(m+1)} \left| \frac{1}{2}, m+1 \right\rangle. \end{aligned} \quad (5.61)$$

Знайдемо матричні елементи $\left\langle \frac{1}{2}, m \left| \hat{J}_+ \right| \frac{1}{2}, m' \right\rangle$:

$$\begin{aligned} (5.61) \Rightarrow \quad \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \hat{J}_+ \right| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \sqrt{\frac{3}{4} - \frac{3}{4}} \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 1 \right\rangle \right. \\ (5.57) \Rightarrow &= \sqrt{0} \cdot 0 \\ &= 0 \\ (5.61) \Rightarrow \quad \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \hat{J}_+ \right| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \sqrt{\frac{3}{4} + \frac{1}{4}} \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right. \\ (5.57) \Rightarrow &= \sqrt{1} \cdot 1 \\ &= 1 \\ (5.61) \Rightarrow \quad \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| \hat{J}_+ \right| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \sqrt{\frac{3}{4} - \frac{3}{4}} \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 1 \right\rangle \right. \\ (5.57) \Rightarrow &= \sqrt{0} \cdot 0 \\ &= 0 \\ (5.61) \Rightarrow \quad \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| \hat{J}_+ \right| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \sqrt{\frac{3}{4} + \frac{1}{4}} \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right. \\ (5.57) \Rightarrow &= \sqrt{1} \cdot 0 \\ &= 0. \end{aligned} \quad (5.62)$$

Отже, **матричний вигляд оператора \hat{J}_+** у базисі $\{|\frac{1}{2}, m\rangle\}$:

$$(5.60), (5.62) \Rightarrow \hat{J}_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.63)$$

Задача 132. Знайти матричний вигляд оператора \hat{J}_- у базисі (5.56).

5.2. Матричний вигляд оператора моменту кількості руху та його власних функцій у випадку $J =$

Розв'язок.

Як відомо, дія оператора \hat{J}_- на довільний вектор $\left|\frac{1}{2}, m\right\rangle$ визначається наступним виразом:

$$\begin{aligned} \hat{J}_- \left|\frac{1}{2}, m\right\rangle &= \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \left|\frac{1}{2}, m-1\right\rangle \\ \left|j = \frac{1}{2}\right\rangle \Rightarrow &= \sqrt{\frac{3}{4} - m(m-1)} \left|\frac{1}{2}, m-1\right\rangle. \end{aligned} \quad (5.64)$$

Знайдемо матричні елементи $\left\langle \frac{1}{2}, m \left| \hat{J}_- \right| \frac{1}{2}, m' \right\rangle$:

$$\begin{aligned} (5.64) \Rightarrow \quad \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \hat{J}_- \right| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \sqrt{\frac{3}{4} + \frac{1}{4}} \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right. \\ (5.57) \Rightarrow &= \sqrt{1} \cdot 0 \\ &= 0 \\ (5.64) \Rightarrow \quad \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \hat{J}_- \right| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \sqrt{\frac{3}{4} - \frac{3}{4}} \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} - 1 \right\rangle \right. \\ (5.57) \Rightarrow &= \sqrt{0} \cdot 0 \\ &= 0 \\ (5.64) \Rightarrow \quad \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| \hat{J}_- \right| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \sqrt{\frac{3}{4} + \frac{1}{4}} \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right. \\ (5.57) \Rightarrow &= \sqrt{1} \cdot 1 \\ &= 1 \\ (5.64) \Rightarrow \quad \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| \hat{J}_- \right| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \sqrt{\frac{3}{4} - \frac{3}{4}} \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} - 1 \right\rangle \right. \\ (5.57) \Rightarrow &= \sqrt{0} \cdot 0 \\ &= 0. \end{aligned} \quad (5.65)$$

Отже, **матричний вигляд оператора \hat{J}_-** у базисі $\left\{ \left|\frac{1}{2}, m\right\rangle \right\}$:

$$(5.60), (5.62) \Rightarrow \hat{J}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.66)$$

Примітка. Матричний вигляд оператора \hat{J}_- можна знайти швидше

наступним чином:

$$\begin{aligned}
 \hat{J}_- &= (\hat{J}_+)^{\dagger} \\
 (5.63) \Rightarrow &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}^{\dagger} \\
 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{5.67}$$

5.2.2 Матричний вигляд компонент оператора моменту кількості руху

Задача 133. Показати, що *матричний вигляд оператора \hat{J}_x у базисі $\{|\frac{1}{2}, m\rangle\}$ можна представити як*

$$\hat{J}_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \equiv \frac{1}{2} \hat{\sigma}_x, \tag{5.68}$$

де $\hat{\sigma}_x$ — x -матриця Паулі.

Розв'язок.

$$\begin{aligned}
 \left| \begin{cases} \hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y \\ \hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y \end{cases} \right| &\Rightarrow \hat{J}_x = \frac{1}{2} (\hat{J}_+ + \hat{J}_-) \\
 (5.63), (5.66) \Rightarrow &= \frac{1}{2} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] \\
 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{5.69}$$

Задача 134. Показати, що *матричний вигляд оператора \hat{J}_y у базисі $\{|\frac{1}{2}, m\rangle\}$ можна представити як*

$$\hat{J}_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \equiv \frac{1}{2} \hat{\sigma}_y, \tag{5.70}$$

де $\hat{\sigma}_y$ — y -матриця Паулі.

Розв'язок.

5.2. Матричний вигляд оператора моменту кількості руху та його власних функцій у випадку $J =$

$$\begin{aligned}
 \left| \begin{cases} \hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y \\ \hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y \end{cases} \right| &\Rightarrow \hat{J}_y = \frac{1}{2i} (\hat{J}_+ - \hat{J}_-) \\
 (5.63), (5.66) \Rightarrow &= \frac{1}{2i} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] \\
 &= \frac{1}{2i} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \\
 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{5.71}$$

Задача 135. Показати, що **матричний вигляд оператора** \hat{J}_z у базисі $\{|\frac{1}{2}, m\rangle\}$ можна представити як

$$\hat{J}_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \equiv \frac{1}{2} \hat{\sigma}_z, \tag{5.72}$$

де $\hat{\sigma}_z$ — z -матриця Паулі.

Розв'язок.

Знайдемо матричні елементи $\left\langle \frac{1}{2}, m \left| \hat{J}_z \right| \frac{1}{2}, m' \right\rangle$:

$$\begin{aligned}
 (5.58) \Rightarrow \quad & \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \hat{J}_z \right| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{2} \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right. \\
 (5.57) \Rightarrow \quad & = \frac{1}{2} \cdot 1 \\
 & = \frac{1}{2} \\
 (5.58) \Rightarrow \quad & \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \hat{J}_z \right| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = -\frac{1}{2} \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right. \\
 (5.57) \Rightarrow \quad & = -\frac{1}{2} \cdot 0 \\
 & = 0 \\
 (5.58) \Rightarrow \quad & \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| \hat{J}_z \right| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{2} \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right. \\
 (5.57) \Rightarrow \quad & = \frac{1}{2} \cdot 0 \\
 & = 0 \\
 (5.58) \Rightarrow \quad & \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| \hat{J}_z \right| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = -\frac{1}{2} \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right. \\
 (5.57) \Rightarrow \quad & = -\frac{1}{2} \cdot 1 \\
 & = -\frac{1}{2}.
 \end{aligned} \tag{5.73}$$

Отже, **матричний вигляд оператора \hat{J}_z** у базисі $\left\{ \left| \frac{1}{2}, m \right\rangle \right\}$:

$$(5.60), (5.73) \Rightarrow \quad \hat{J}_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{5.74}$$

Примітка. Оператор \hat{J}_z у матричному вигляді можна також отримати, скориставшись комутаційними співвідношеннями для компонент

5.2. Матричний вигляд оператора моменту кількості руху та його власних функцій у випадку $J =$

оператора \hat{J} :

$$\begin{aligned}
 \left| [\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\varepsilon_{ijk} \hat{J}_k \right| &\Rightarrow i\hat{J}_z = [\hat{J}_x, \hat{J}_y] \\
 &= \hat{J}_x \hat{J}_y - \hat{J}_y \hat{J}_x \\
 (5.68), (5.70) &\Rightarrow = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\
 &\quad - \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.75) \\
 &= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} - \frac{1}{4} \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} \\
 &= \frac{i}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.
 \end{aligned}$$

5.2.3 Матричний вигляд квадрата оператора кількості руху для $j = 1/2$

Задача 136. Показати, що матричний вигляд оператора \hat{J}^2 для $j = 1/2$

$$\hat{J}^2 = \frac{3}{4} \hat{I}. \quad (5.76)$$

Розв'язок.

$$\begin{aligned}
 \hat{J}^2 &= \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 \\
 (5.68), (5.70), (5.72) &\Rightarrow = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\
 &\quad + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\
 &= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\
 &= \frac{3}{4} \hat{I}. \quad (5.77)
 \end{aligned}$$

5.2.4 Явний вигляд елементів базису $\left\{\left|\frac{1}{2}, m\right\rangle\right\}$

Елементи базису $\left\{\left|\frac{1}{2}, m\right\rangle\right\}$ у матричному представленні мають вигляд

$$\left\{\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle, \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle\right\} = \left\{\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\right\}. \quad (5.78)$$

Задача 137. Використовуючи матричний вигляд операторів \hat{J}_{\pm} , довести, що базисні елементи $\left\{\left|\frac{1}{2}, m\right\rangle\right\}$ мають вигляд (5.78).

Розв'язок.

Оскільки у випадку $j = 1/2$ гільбертів простір двовимірний, то базисні елементи $\left\{\left|\frac{1}{2}, m\right\rangle\right\}$ можна представити у вигляді двовимірних вектор-стовпчиків, зокрема

$$\begin{aligned} \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle &= \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \\ \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle &= \begin{pmatrix} \delta \\ \gamma \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (5.79)$$

Для $\hat{J}_+ \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle$ маємо:

$$\begin{aligned} (5.61) \Rightarrow \quad 0 &= \hat{J}_+ \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \\ (5.63), (5.79) \Rightarrow \quad &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \beta \\ 0 \end{pmatrix} \\ \Rightarrow \quad &\beta = 0 \\ (5.79) \Rightarrow \quad \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle &= \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ (5.57) \Rightarrow \quad \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (5.80)$$

5.2. Матричний вигляд оператора моменту кількості руху та його власних функцій у випадку $J =$

Для $\hat{J}_- \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$ маємо:

$$\begin{aligned}
 (5.61) \Rightarrow \quad 0 &= \hat{J}_- \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\
 (5.66), (5.79) \Rightarrow \quad &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma \\ \delta \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} 0 \\ \gamma \end{pmatrix} \\
 \Rightarrow \quad &\gamma = 0 \\
 (5.79) \Rightarrow \quad \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \delta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\
 (5.57) \Rightarrow \quad \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{5.81}$$

5.2.5 Оператори повороту навколо координатних осей для $j = 1/2$

Для частинки з $j = 1/2$ оператор повороту $\hat{R}_{k,\phi}$ на кут ϕ навколо осі Ox_k має вигляд

$$\begin{aligned}
 \hat{R}_{k,\phi} &= e^{i\phi\hat{J}_k} \\
 (5.68), (5.70), (5.72) \Rightarrow \quad &\equiv e^{i\phi\hat{\sigma}_k/2}.
 \end{aligned} \tag{5.82}$$

Задача 138. Показати, що оператор повороту $\hat{R}_{x,\phi}$ на кут ϕ навколо осі Ox має вигляд

$$\hat{R}_{x,\phi} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\phi}{2} & i \sin \frac{\phi}{2} \\ i \sin \frac{\phi}{2} & \cos \frac{\phi}{2} \end{pmatrix}. \tag{5.83}$$

Розв'язок.

Знайдемо $\hat{\sigma}_x^2$:

$$\begin{aligned}
 \hat{\sigma}_x^2 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\
 &= \hat{I}.
 \end{aligned} \tag{5.84}$$

Тоді для $\hat{R}_{x,\phi}$ маємо:

$$\begin{aligned}
 (5.82) \Rightarrow \hat{R}_{x,\phi} &= e^{i\phi\hat{\sigma}_x/2} \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\phi/2)^n}{n!} \hat{\sigma}_x^n \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\phi/2)^{2n}}{(2n)!} \hat{\sigma}_x^{2n} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\phi/2)^{2n+1}}{(2n+1)!} \hat{\sigma}_x^{2n+1} \\
 (5.84) \Rightarrow &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\phi/2)^{2n}}{(2n)!} \hat{I} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\phi/2)^{2n+1}}{(2n)!} \hat{\sigma}_x \\
 &= \cosh\left(\frac{i\phi}{2}\right) \hat{I} + \sinh\left(\frac{i\phi}{2}\right) \hat{\sigma}_x \\
 &= \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) \hat{I} + i \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \hat{\sigma}_x \\
 &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\phi}{2} & 0 \\ 0 & \cos \frac{\phi}{2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & i \sin \frac{\phi}{2} \\ i \sin \frac{\phi}{2} & 0 \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\phi}{2} & i \sin \frac{\phi}{2} \\ i \sin \frac{\phi}{2} & \cos \frac{\phi}{2} \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{5.85}$$

Задача 139. Показати, що оператор повороту $\hat{R}_{y,\phi}$ на кут ϕ навколо осі Oy має вигляд

$$\hat{R}_{y,\phi} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\phi}{2} & \sin \frac{\phi}{2} \\ -\sin \frac{\phi}{2} & \cos \frac{\phi}{2} \end{pmatrix}. \tag{5.86}$$

Задача 140. Показати, що оператор повороту $\hat{R}_{z,\phi}$ на кут ϕ навколо осі Oz має вигляд

$$\hat{R}_{z,\phi} = \begin{pmatrix} e^{i\phi/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\phi/2} \end{pmatrix}. \tag{5.87}$$

5.3 Явний вигляд оператора моменту кількості руху та його власних функцій у випадку $j = 1$

У випадку $j = 1$ (в одиницях \hbar) проекція моменту кількості руху m на вісь квантування може приймати 3 значення: $m = \{1, 0, -1\}$. Це означає, що базис $\{|j = 1, m\rangle\}$ складається з 3 елементів

$$\{|1, m\rangle\} \equiv \{|1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle\}, \quad (5.88)$$

тобто розмірність простору Гільберта для моменту кількості руху у випадку $j = 1$ рівна 3.

Базисні елементи (5.88) є власними функціями ермітового оператора \hat{J}_z

$$\hat{J}_z |1, m\rangle = m |1, m\rangle, \quad (5.89)$$

що відповідають різним власним значенням m . Отже, вони є ортогональними; нормувавши їх на одиницю, отримаємо

$$\langle 1, m | 1, m' \rangle = \delta_{mm'}. \quad (5.90)$$

Довільний оператор \hat{A} , що визначений у просторі Гільберта для моменту кількості руху $j = 1$, можна представити у вигляді комплексної матриці 3×3 :

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} \langle 1, 1 | \hat{A} | 1, 1 \rangle & \langle 1, 1 | \hat{A} | 1, 0 \rangle & \langle 1, 1 | \hat{A} | 1, -1 \rangle \\ \langle 1, 0 | \hat{A} | 1, 1 \rangle & \langle 1, 0 | \hat{A} | 1, 0 \rangle & \langle 1, 0 | \hat{A} | 1, -1 \rangle \\ \langle 1, -1 | \hat{A} | 1, 1 \rangle & \langle 1, -1 | \hat{A} | 1, 0 \rangle & \langle 1, -1 | \hat{A} | 1, -1 \rangle \end{pmatrix}. \quad (5.91)$$

Задача 141. Знайти матричний вигляд оператора \hat{J}_+ у базисі $\{|j, m\rangle\}$ для $j = 1$.

Задача 142. Знайти матричний вигляд оператора \hat{J}_- у базисі $\{|j, m\rangle\}$ для $j = 1$.

Задача 143. Знайти матричний вигляд оператора \hat{J}_x у базисі $\{|j, m\rangle\}$ для $j = 1$.

Задача 144. Знайти матричний вигляд оператора \hat{J}_y у базисі $\{|j, m\rangle\}$ для $j = 1$.

Задача 145. Знайти матричний вигляд оператора \hat{J}_z у базисі $\{|jm\rangle\}$ для $j = 1$.

Задача 146. Знайти матричний вигляд оператора \hat{J}^2 у базисі $\{|jm\rangle\}$ для $j = 1$.

Задача 147. Знайти явний вигляд елементів базису $\{|jm\rangle\}$ для $j = 1$.

5.4 Спін. Матриці Паулі

5.4.1 Матриці Паулі

Як відомо, повний момент кількості руху, який описується оператором $\hat{\vec{J}}$, можна розкласти на дві складові:

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}, \quad (5.92)$$

де $\hat{\vec{L}}$ — оператор орбітального моменту, $\hat{\vec{S}}$ — оператор власного моменту частинки (спіну).

Орбітальний момент описується квантовим числом l , яке може приймати **лише значення** $0, \hbar, 2\hbar, \dots$. Спін описується квантовим числом s , яке може приймати як цілі, так і напівцілі значення $0, \frac{\hbar}{2}, \hbar, \frac{3\hbar}{2}, \dots$.

Розглянемо випадок, коли частинка описується лише спіновим квантовим числом $s = \frac{\hbar}{2}$. Тобто $l = 0$, $m_l = 0$, а рівність (5.92) має вигляд

$$\hat{\vec{J}} \Big|_{l=0} = \hat{\vec{S}}. \quad (5.93)$$

Власні значення проекції спіну $\hat{\vec{S}}$ тоді співпадають із власними значеннями $\hat{\vec{J}}$ та дорівнюють $\pm \frac{\hbar}{2}$. Комутаційні співвідношення для $\hat{\vec{S}}$:

$$\begin{aligned} [\hat{J}_i, \hat{J}_j] &= i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{J}_k \\ (5.93) \Rightarrow [\hat{S}_i, \hat{S}_j] &= i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{S}_k, \end{aligned} \quad (5.94)$$

де ε_{ijk} — символ Леві-Чивіті.

Оскільки власні значення спіну вимірюються в одиницях $\frac{\hbar}{2}$, то зручно перейти до безрозмірних операторів

$$\hat{\vec{S}} = \frac{\hbar}{2} \hat{\vec{\sigma}}, \quad (5.95)$$

де $\hat{\vec{\sigma}}$ — т.зв. **матриці Паулі**. Власні значення матриць Паулі, відповідно, будуть дорівнювати ± 1 (власні значення спіну, поділені на $\frac{\hbar}{2}$).

Очевидно, що

$$\begin{aligned} \hat{S}^\dagger &= \hat{S} \\ (5.95) \Rightarrow \hat{\sigma}^\dagger &= \hat{\sigma}, \end{aligned} \quad (5.96)$$

тобто матриці Паулі **ермітові**.

Задача 148. Показати, що

$$\forall i = \overline{1, 3}, \quad \hat{\sigma}_i^2 = \hat{I}, \quad (5.97)$$

де \hat{I} — одинична матриця.

Розв'язок.

Власні значення будь-якої матриці Паулі рівні ± 1 . Це означає, що у власному базисі (коли базис співпадає з власними векторами) довільна матриця Паулі має вигляд

$$\hat{U}_i \hat{\sigma}_i \hat{U}_i^\dagger = \hat{\sigma}_{i, \text{diag}} = \begin{pmatrix} \pm 1 & 0 \\ 0 & \mp 1 \end{pmatrix}, \quad (5.98)$$

де \hat{U}_i — унітарна матриця, яка приводить матрицю $\hat{\sigma}_i$ до діагонального вигляду.

Обчислимо $(\hat{\sigma}_{i, \text{diag}})^2$:

$$\begin{aligned} (5.98) \Rightarrow (\hat{\sigma}_{i, \text{diag}})^2 &= \begin{pmatrix} \pm 1 & 0 \\ 0 & \mp 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \pm 1 & 0 \\ 0 & \mp 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} (\pm 1)^2 & 0 \\ 0 & (\mp 1)^2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \hat{I}. \end{aligned} \quad (5.99)$$

Отже,

$$\begin{aligned} (5.99) \Rightarrow \hat{I} &= (\hat{\sigma}_{i, \text{diag}})^2 \\ (5.98) \Rightarrow &= \hat{U}_i \hat{\sigma}_i \hat{U}_i^\dagger \hat{U}_i \hat{\sigma}_i \hat{U}_i^\dagger \\ &= \hat{U}_i \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_i \hat{U}_i^\dagger \\ &= \hat{U}_i \hat{\sigma}_i^2 \hat{U}_i^\dagger \\ \left| \hat{U}_i^\dagger \bullet \hat{U}_i \right| \Rightarrow \hat{\sigma}_i^2 &= \hat{U}_i^\dagger \hat{I} \hat{U}_i \\ &= \hat{U}_i^\dagger \hat{U}_i \\ &= \hat{I}, \end{aligned} \quad (5.100)$$

що й треба було довести.

5.4.2 Матриці Паулі: комутатор

Задача 149. Показати, що **комутатор матриць Паулі** рівний

$$[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k. \quad (5.101)$$

Розв'язок.

$$\begin{aligned} (5.94), (5.95) &\Rightarrow \left[\frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_i, \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_j \right] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_k \\ &\Rightarrow \frac{\hbar^2}{4}[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] = i\frac{\hbar^2}{2}\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k \\ &\Rightarrow [\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k. \end{aligned} \quad (5.102)$$

5.4.3 Матриці Паулі: антикомутатор

Задача 150. Показати, що **антикомутатор матриць Паулі** рівний

$$\{\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j\} = 2\delta_{ij}, \quad (5.103)$$

де δ_{ij} — символ δ -Кронекера.

Розв'язок.

$$\begin{aligned} (5.101) &\Rightarrow \hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j - \hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_i = \pm 2i\hat{\sigma}_k, \quad i \neq j \neq k \\ \left| \begin{array}{c} \hat{\sigma}_i \bullet \\ \bullet \hat{\sigma}_i \end{array} \right| &\Rightarrow \begin{cases} \hat{\sigma}_i^2\hat{\sigma}_j - \hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_i = \pm 2i\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_k \\ \hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_i - \hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_i^2 = \pm 2i\hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_i \end{cases}, \quad i \neq j \neq k \\ (5.97) &\Rightarrow \begin{cases} \hat{\sigma}_j - \hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_i = \pm 2i\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_k \\ \hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_i - \hat{\sigma}_j = \pm 2i\hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_i \end{cases}, \quad i \neq j \neq k \\ &\Rightarrow \pm 2i(\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_k + \hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_i) = 0, \quad i \neq k \\ \left| k \rightarrow j \right| &\Rightarrow \hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j + \hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_i = 0, \quad i \neq j \\ (5.97) &\Rightarrow \hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j + \hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_i = 2\delta_{ij}. \end{aligned} \quad (5.104)$$

5.4.4 Добуток матриць Паулі

Задача 151. Показати, що

$$\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j = \delta_{ij} + i\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k. \quad (5.105)$$

Розв'язок.

$$\begin{aligned}
 (5.101), (5.103) &\Rightarrow \begin{cases} \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j - \hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_i = 2i\varepsilon_{ijk} \hat{\sigma}_k \\ \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j + \hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_i = 2\delta_{ij} \end{cases} \\
 &\Rightarrow \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j + \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j = 2\delta_{ij} + 2i\varepsilon_{ijk} \hat{\sigma}_k \\
 &\Rightarrow \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j = \delta_{ij} + i\varepsilon_{ijk} \hat{\sigma}_k
 \end{aligned} \tag{5.106}$$

Примітка. З (5.105) випливає, що довільний вираз, який містить добуток довільного числа матриць Паулі, можна звести до лінійного вигляду. Тобто, для довільної функції $f(x)$ виконується наступне:

$$f(\vec{\hat{\sigma}}) = a\hat{I} + \vec{b} \cdot \vec{\hat{\sigma}}, \tag{5.107}$$

де $a = \text{const}$, \vec{b} — сталий вектор.

5.4.5 Явний вигляд матриць Паулі

Якщо за вісь квантування обрати вісь Oz , то оператор $\hat{\sigma}_z$ тоді буде мати діагональний вигляд (оскільки його власні вектори будуть формувати базис), де на діагоналі стоятимуть власні значення ± 1 :

$$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{5.108}$$

Тоді для вектора $|1, z\rangle$, що відповідає власному значенню $+1$, можна записати

$$\begin{aligned}
 \hat{\sigma}_z |1, z\rangle &= |1, z\rangle \\
 \left| (5.108), |1, z\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \right| &\Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \\
 &\Rightarrow \begin{pmatrix} \alpha \\ -\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \\
 &\Rightarrow |1, z\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ 0 \end{pmatrix} \\
 \left| \langle 1, z | 1, z \rangle = 1 \right| &\Rightarrow |1, z\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{5.109}$$

Аналогічно знаходимо, що для вектора $|-1, z\rangle$, що відповідає власному значенню -1 ,

$$\begin{aligned}
 \hat{\sigma}_z |-1, z\rangle &= -|-1, z\rangle \\
 \Rightarrow |-1, z\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{5.110}$$

Примітка. Базис, в якому $\hat{\sigma}_z$ має вигляд (5.108) із власними векторами (5.109) та (5.110), називається **z -представленням**.

Задача 152. Показати, що у z -представленні оператор (матриця Паулі) $\hat{\sigma}_x$ має вигляд

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.111)$$

Розв'язок.

В загальному випадку оператор $\hat{\sigma}_x$ можна представити як комплексну матрицю виду

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}. \quad (5.112)$$

Тоді

$$\begin{aligned} (5.103) &\Rightarrow \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z = -\hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x \\ &\Rightarrow \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & b \\ c & 0 \end{pmatrix} \\ (5.96), (5.97) &\Rightarrow \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\phi} \\ e^{-i\phi} & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (5.113)$$

звідки, поклавши $\phi = 0$, отримуємо (5.111).

Задача 153. Показати, що у z -представленні $\hat{\sigma}_y$ має вигляд

$$\hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.114)$$

Розв'язок.

$$\begin{aligned} (5.105) &\Rightarrow \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x = i \hat{\sigma}_y \\ (5.108), (5.111) &\Rightarrow i \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (5.115)$$

Задача 154. Знайти власний вектор $|1, x\rangle$ оператора $\hat{\sigma}_x$ у z -представленні.

Розв'язок.

$$\begin{aligned}
 \hat{\sigma}_x |1, x\rangle &= |1, x\rangle \\
 \left| (5.111), |1, x\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \right| &\Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \\
 &\Rightarrow \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \\
 &\Rightarrow |1, x\rangle = \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\
 \left| \langle 1, x | 1, x \rangle = 1 \right| &\Rightarrow |1, x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{5.116}$$

Задача 155. Знайти власний вектор $|-1, x\rangle$ оператора $\hat{\sigma}_x$ у z -представленні.

Задача 156. Знайти власний вектор $|1, y\rangle$ оператора $\hat{\sigma}_y$ у z -представленні.

Задача 157. Знайти власний вектор $|-1, y\rangle$ оператора $\hat{\sigma}_y$ у z -представленні.

Розділ 6

Матриця густини

6.1 Матриця густини однокомпонентної системи. Чисті та змішані стани

Опис за допомогою хвильових функцій не охоплює всі можливі стани, в яких може перебувати квантова система. Приміром, якщо система перебуває з імовірністю $p \neq 0$ у стані $|\psi\rangle$ та з імовірністю $q = 1 - p \neq 0$ — у стані $|\varphi\rangle \neq |\psi\rangle$, то такий стан **не можна** описати лінійною комбінацією (суперпозицією) станів $|\psi\rangle$ та $|\varphi\rangle$.

Такий випадок можна описати як **статистичну суміш** (з ваговими коефіцієнтами p та $q = 1 - p$) станів $|\psi\rangle$ та $|\varphi\rangle$.

Математично такі суміші описуються за допомогою **матриці густини** (або **статистичного оператора**) $\hat{\rho}$, яка має вигляд

$$\hat{\rho} = p |\psi\rangle \langle\psi| + q |\varphi\rangle \langle\varphi|. \quad (6.1)$$

Примітка. Квантові стани, які можна описати однією хвильовою функцією, називають **чистими станами**. Квантові стани, які можна описати лише як статистичну суміш хвильових функцій, називають **змішаними станами**.

Опис квантових систем за допомогою матриці густини є найбільш повним способом опису станів у квантовій механіці.

В загальному випадку, якщо є набір хвильових функцій $\{|\psi_n\rangle\}$ з відповідними ваговими коефіцієнтами $\{p_n\}$, то матриця густини такої системи визначається як

$$\hat{\rho} = \sum_n p_n |\psi_n\rangle \langle\psi_n|, \quad 0 \leq p_n \leq 1, \quad \sum_n p_n = 1, \quad (6.2)$$

тобто p_n — це імовірність знайти систему у стані $|\psi_n\rangle$.

З (6.2) видно, що матриця густини є ермітовим оператором, тобто

$$\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}, \quad (6.3)$$

отже їй відповідає спостережувана величина.

Якщо $p_n = \delta_{nn'}$, то матриця густини такої системи буде

$$\begin{aligned} (6.2) \Rightarrow \hat{\rho} &= \sum_n p_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \\ &= \sum_n \delta_{nn'} |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \\ &= |\psi_{n'}\rangle \langle \psi_{n'}|, \end{aligned} \quad (6.4)$$

тобто система перебуватиме у чистому стані $|\psi_{n'}\rangle$.

Умову нормування матриці густини можна визначити наступним чином:

$$\text{Tr } \hat{\rho} = 1. \quad (6.5)$$

Якщо система перебуває в **чистому стані** (= може бути описана хвильовою функцією), то

$$\begin{aligned} \hat{\rho}^2 &= \hat{\rho} \\ \Downarrow \\ \text{Tr } \hat{\rho}^2 &= \text{Tr } \hat{\rho} = 1. \end{aligned} \quad (6.6)$$

Якщо система перебуває у **змішаному стані** (= не може бути описана однією хвильовою функцією), то

$$\begin{aligned} \hat{\rho}^2 &\neq \hat{\rho} \\ \Downarrow \\ \text{Tr } \hat{\rho}^2 &< 1 \neq \text{Tr } \hat{\rho} = 1, \end{aligned} \quad (6.7)$$

тобто у **змішаному стані** квадрат матриці густини не співпадає з нею, а **трейс її квадрата не дорівнює трейсу від неї**. Якщо матриця густини нормована на одиницю, див. (6.5), то у **змішаному стані** **трейс квадрата матриці густини завжди менший за одиницю**.

Середнє значення оператора \hat{O} у стані, що описується матрицею густини $\hat{\rho}$, визначається як

$$\langle O \rangle = \text{Tr } \hat{\rho} \hat{O}. \quad (6.8)$$

Позначення. Введемо позначення

$$\forall n, |\psi_n\rangle \equiv |n\rangle, \quad (6.9)$$

причому стани $\{|n\rangle\}$ утворюють ортонормований базис, тобто

$$\langle n | k \rangle = \delta_{nk}. \quad (6.10)$$

Примітка. Умова (6.10) не є обов'язковою. Тут вона використовується **виключно** з метою простоти викладу матеріалу.

Примітка. Надалі вважаємо, що гільбертів простір двовимірний, тобто що $n = \overline{0, 1}$. Тоді базис $\{|n\rangle\}$ в такому просторі можна представити у вигляді векторів

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (6.11)$$

Дана умова накладається з метою простоти викладу матеріалу (зокрема, для спрощення роботи в матричному вигляді) та не є обов'язковою. Весь формалізм матриці густини застосовний для просторів Гільберта довільної розмірності, які можуть включати неперервний спектр базисних станів.

Операція взяття трейсу від довільного оператора \hat{O} , наприклад, у базисі $\{|n\rangle\}$ в позначеннях Дірака виглядатиме наступним чином:

$$\text{Tr } \hat{O} = \sum_n \langle n | O | n \rangle \equiv \sum_n O_{nn}, \quad (6.12)$$

де O_{nn} – діагональні матричні елементи оператора \hat{O} у матричному вигляді.

Задача 158. Для системи, яка перебуває у стані

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (6.13)$$

побудувати матрицю густини в:

- позначеннях Дірака
- матричному вигляді.

Розв'язок.

Імовірність перебування системи у стані $|0\rangle$ рівна 1.

- Матриця густини в **позначеннях Дірака**, яка відповідає стану (6.13):

$$(6.2), (6.13) \Rightarrow \hat{\rho} = |0\rangle \langle 0|. \quad (6.14)$$

- **Матричний вигляд** матриці густини, яка відповідає стану (6.13):

$$\begin{aligned}
 (6.14) \Rightarrow \hat{\rho} &= |0\rangle \langle 0| \\
 &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{6.15}$$

Задача 159. Для системи, яка перебуває в станах $|\chi_1\rangle$ та $|\chi_2\rangle$ з відповідними імовірностями p_1 та p_2

$$\begin{aligned}
 |\chi_1\rangle &= |1\rangle, & p_1 &= \frac{1}{3} \\
 |\chi_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle), & p_2 &= \frac{2}{3},
 \end{aligned} \tag{6.16}$$

побудувати матрицю густини в:

- позначеннях Дірака
- матричному вигляді.

Розв'язок.

- Позначення Дірака:

$$\begin{aligned}
 (6.2) \Rightarrow \hat{\rho} &= p_1 |\chi_1\rangle \langle \chi_1| + p_2 |\chi_2\rangle \langle \chi_2| \\
 (6.16) \Rightarrow &= \frac{1}{3} |1\rangle \langle 1| + \frac{2}{3} \cdot \frac{1}{2} (|0\rangle - |1\rangle) (\langle 0| - \langle 1|) \\
 &= \frac{1}{3} |1\rangle \langle 1| + \frac{1}{3} (|0\rangle \langle 0| - |0\rangle \langle 1| - |1\rangle \langle 0| + |1\rangle \langle 1|) \\
 &= \frac{1}{3} (|0\rangle \langle 0| - |0\rangle \langle 1| - |1\rangle \langle 0|) + \frac{2}{3} |1\rangle \langle 1|.
 \end{aligned} \tag{6.17}$$

- Матричний вигляд:

$$\begin{aligned}
 (6.17) \Rightarrow \hat{\rho} &= \frac{1}{3} (|0\rangle \langle 0| - |0\rangle \langle 1| - |1\rangle \langle 0|) + \frac{2}{3} |1\rangle \langle 1| \\
 (6.11) \Rightarrow &= \frac{1}{3} \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1 \ 0) - \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (0 \ 1) - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (1 \ 0) \right] \\
 &+ \frac{2}{3} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (0 \ 1) \\
 &= \frac{1}{3} \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] + \frac{2}{3} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (6.18) \\
 &= \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} + \frac{2}{3} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} \end{pmatrix}.
 \end{aligned}$$

Задача 160. Для системи, яка перебуває в станах $|\chi_1\rangle$ та $|\chi_2\rangle$ з відповідними ймовірностями p_1 та p_2

$$\begin{aligned}
 |\varphi_1\rangle &= \frac{1}{2} |0\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2} |1\rangle, \quad p_1 = \frac{1}{2} \\
 |\varphi_2\rangle &= |1\rangle, \quad p_2 = \frac{1}{2},
 \end{aligned} \quad (6.19)$$

побудувати матрицю густини в:

- позначеннях Дірака
- матричному вигляді.

Задача 161. Перевірити умову нормування для матриці густини, яка відповідає станові (6.13), у:

- позначеннях Дірака
- матричному вигляді.

Розв'язок.

- Позначення Дірака:

$$\begin{aligned}
 (6.14) \Rightarrow \text{Tr } \hat{\rho} &= \text{Tr } |0\rangle \langle 0| \\
 (6.12) \Rightarrow &= \langle 0| (|0\rangle \langle 0|) |0\rangle + \langle 1| (|0\rangle \langle 0|) |1\rangle \\
 &= \langle 0|0\rangle \langle 0|0\rangle + \langle 1|0\rangle \langle 0|1\rangle \\
 (6.10) \Rightarrow &= 1^2 + 0^2 \\
 &= 1.
 \end{aligned} \quad (6.20)$$

- Матричний вигляд:

$$\begin{aligned}
 (6.15) \Rightarrow \operatorname{Tr} \hat{\rho} &= \operatorname{Tr} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 &= 1 + 0 \\
 &= 1.
 \end{aligned} \tag{6.21}$$

Примітка. Позначення Дірака для матриці густини зазвичай простіші у використанні, оскільки не вимагають попереднього обчислення всіх матричних елементів у явному вигляді.

Задача 162. *Перевірити умову нормування для матриці густини, яка відповідає станові (6.19), у:*

- позначеннях Дірака
- матричному вигляді.

Задача 163. *Переконавшись, що матриця густини, яка відповідає стану (6.13), описує чистий стан. Розрахунки провести у:*

- позначеннях Дірака
- матричному вигляді.

Розв'язок.

- Позначення Дірака:

$$\begin{aligned}
 (6.14) \Rightarrow \hat{\rho}^2 &= (|0\rangle \langle 0|)^2 \\
 &= |0\rangle \langle 0| 0\rangle \langle 0| \\
 (6.10) \Rightarrow &= |0\rangle \langle 0| \\
 (6.14) \Rightarrow &= \hat{\rho} \\
 &\Downarrow \\
 \operatorname{Tr} \hat{\rho}^2 &= \operatorname{Tr} \hat{\rho},
 \end{aligned} \tag{6.22}$$

отже стан чистий.

- Матричний вигляд:

$$\begin{aligned}
 (6.15) \Rightarrow \quad \hat{\rho}^2 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 (6.15) \Rightarrow \quad &= \hat{\rho} \\
 &\Downarrow \\
 \text{Tr } \hat{\rho}^2 &= \text{Tr } \hat{\rho},
 \end{aligned} \tag{6.23}$$

отже стан чистий.

Задача 164. З'ясувати, який стан – чистий чи змішаний – описує матриця густини

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}. \tag{6.24}$$

Задача 165. Показати, що матриця густини, яка відповідає стану (6.16), описує змішаний стан. Розрахунки провести у:

- позначеннях Дірака
- матричному вигляді.

Задача 166. Знайти середнє значення $\langle \hat{H} \rangle$ оператора

$$\hat{H} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \tag{6.25}$$

у стані (6.13), використовуючи формалізм матриці густини.

Розв'язок.

Оскільки оператор \hat{H} заданий у матричному вигляді, то розрахунки проводитимемо також у матричному вигляді. Стану (6.13) відповідає матриця густини (6.15), отже

$$\begin{aligned}
 (6.8) \Rightarrow \quad \langle H \rangle &= \text{Tr } \hat{\rho} \hat{H} \\
 (6.15), (6.25) \Rightarrow \quad &= \text{Tr} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \right] \\
 &= \text{Tr} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} + 0 \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}}.
 \end{aligned} \tag{6.26}$$

Задача 167. Знайти середнє значення оператора

$$\hat{\sigma}_z = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1| \quad (6.27)$$

у стані (6.16).

Розв'язок.

Оскільки оператор $\hat{\sigma}_z$ представлений в позначеннях Дірака, то й матрицю густини для стану (6.16) візьмемо в позначеннях Дірака (6.17).

Знайдемо добуток операторів $\hat{\rho}\hat{\sigma}_z$:

$$\begin{aligned} (6.17), (6.27) \Rightarrow \hat{\rho}\hat{\sigma}_z &= \left[\frac{1}{3} (|0\rangle\langle 0| - |0\rangle\langle 1| - |1\rangle\langle 0|) + \frac{2}{3} |1\rangle\langle 1| \right] \\ &\quad \times (|0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|) \\ &= \frac{1}{3} (|0\rangle\langle 0|0\rangle\langle 0| - |0\rangle\langle 0|1\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 0|0\rangle\langle 0| \\ &\quad + \frac{2}{3} |1\rangle\langle 1|0\rangle\langle 0| \\ &\quad - \frac{1}{3} (|0\rangle\langle 0|1\rangle\langle 1| - |0\rangle\langle 1|1\rangle\langle 1| - |1\rangle\langle 0|1\rangle\langle 1|) \\ &\quad - \frac{2}{3} |1\rangle\langle 1|1\rangle\langle 1| \\ (6.10) \Rightarrow &= \frac{1}{3} |0\rangle\langle 0| - \frac{1}{3} |1\rangle\langle 0| + \frac{1}{3} |0\rangle\langle 1| - \frac{2}{3} |1\rangle\langle 1|. \end{aligned} \quad (6.28)$$

Тоді для середнього значення оператора $\langle\sigma_z\rangle$

$$\begin{aligned} (6.8) \Rightarrow \langle\sigma_z\rangle &= \text{Tr } \hat{\rho}\hat{\sigma}_z \\ (6.28) \Rightarrow &= \text{Tr} \left(\frac{1}{3} |0\rangle\langle 0| - \frac{1}{3} |1\rangle\langle 0| + \frac{1}{3} |0\rangle\langle 1| - \frac{2}{3} |1\rangle\langle 1| \right) \\ (6.12) \Rightarrow &= \langle 0| \left(\frac{1}{3} |0\rangle\langle 0| - \frac{1}{3} |1\rangle\langle 0| + \frac{1}{3} |0\rangle\langle 1| - \frac{2}{3} |1\rangle\langle 1| \right) |0\rangle \\ &\quad + \langle 1| \left(\frac{1}{3} |0\rangle\langle 0| - \frac{1}{3} |1\rangle\langle 0| + \frac{1}{3} |0\rangle\langle 1| - \frac{2}{3} |1\rangle\langle 1| \right) |1\rangle \\ (6.10) \Rightarrow &= \frac{1}{3} \cdot 1^2 - \frac{1}{3} \cdot 0 \cdot 1 + \frac{1}{3} \cdot 1 \cdot 0 - \frac{2}{3} \cdot 0^2 \\ &\quad + \frac{1}{3} \cdot 0^2 - \frac{1}{3} \cdot 1 \cdot 0 + \frac{1}{3} \cdot 0 \cdot 1 - \frac{2}{3} \cdot 1^2 \\ &= \frac{1}{3} - \frac{2}{3} \\ &= -\frac{1}{3}. \end{aligned} \quad (6.29)$$

Задача 168. Знайти середнє значення оператора

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.30)$$

у стані, який описується матрицею густини (6.24).

6.2 Матриця густини багатокomпонентної системи

Систему, яка складається з кількох підсистем (наприклад, двох), та перебуває у чистому стані (тобто може бути описана хвильовою функцією), можна описати в загальному випадку як

$$|\psi\rangle = \sum_{ij} a_{ij} |\chi_i \varphi_j\rangle \equiv \sum_{ij} a_{ij} |\chi_i\rangle_1 |\varphi_j\rangle_2 = \sum_{ij} a_{ij} |\chi_i\rangle_1 \otimes |\varphi_j\rangle_2, \quad (6.31)$$

де індекси 1 та 2 позначають різні підсистеми, а \otimes – операція тензорного добутку.

Примітка. Щоб представити вектори $|\chi_i\rangle_1 \otimes |\varphi_j\rangle_2$ у вигляді векторів-стовпчиків, необхідно **кожний** елемент вектора-стовпчика $|\chi_i\rangle_1$ помножити на **весь** вектор-стовпчик $|\varphi_j\rangle_2$ (див. (6.33)).

Надалі для простоти розглядатимемо такі підсистеми, кожна з яких визначена у двовимірному гільбертовому просторі. Відповідно, розмірність гільбертового простору всієї системи буде рівна 4.

Примітка. Розмірність гільбертових просторів підсистем (як і всієї системи) може бути довільною.

В якості базисних векторів підсистем 1 та 2 оберемо базис (6.11); тоді базисні вектори системи будуть

$$|00\rangle \quad |01\rangle \quad |10\rangle \quad |11\rangle. \quad (6.32)$$

Зокрема, якщо представити кожний елемент базису (6.32) у вигляді вектора-стовпчика в позначеннях (6.11), то вони матимуть наступний

вигляд (див. Примітка. під виразом (6.31)):

$$\begin{aligned}
 |00\rangle &\equiv |0\rangle_1 |0\rangle_2 = |0\rangle_1 \otimes |0\rangle_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ 0 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\
 |01\rangle &\equiv |0\rangle_1 |1\rangle_2 = |0\rangle_1 \otimes |1\rangle_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ 0 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\
 |10\rangle &\equiv |1\rangle_1 |0\rangle_2 = |1\rangle_1 \otimes |0\rangle_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ 1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\
 |11\rangle &\equiv |1\rangle_1 |1\rangle_2 = |1\rangle_1 \otimes |1\rangle_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ 1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{6.33}$$

Стан (6.31) можна записати в базисі (6.32) як

$$|\psi\rangle = \sum_{ij} \alpha_{ij} |i\rangle_1 |j\rangle_2 \equiv \sum_{ij} \alpha_{ij} |ij\rangle. \tag{6.34}$$

Матриця густини $\hat{\rho}$, яка відповідає стану (6.34), визначається як

$$\begin{aligned}
 (6.2) \Rightarrow \quad \hat{\rho} &= |\psi\rangle \langle\psi| \\
 &= |\psi\rangle (|\psi\rangle)^\dagger \\
 (6.34) \Rightarrow \quad &= \sum_{ij} \alpha_{ij} |ij\rangle \sum_{i'j'} \alpha_{i'j'}^* \langle i'j'| \\
 &= \sum_{ii'jj'} \alpha_{ij} \alpha_{i'j'}^* |ij\rangle \langle i'j'|.
 \end{aligned} \tag{6.35}$$

Скалярний добуток базисних векторів $|i\rangle_1 |j\rangle_2 \equiv |ij\rangle$ визначається як

$$\begin{aligned}
 \langle ij | nk \rangle &\equiv ({}_1\langle i| \otimes {}_2\langle j|) (|n\rangle_1 \otimes |k\rangle_2) \\
 &= {}_1\langle i | n \rangle_1 {}_2\langle j | k \rangle_2 \\
 (6.10) \Rightarrow \quad &= (\delta_{in})_1 (\delta_{jk})_2 \\
 &= \delta_{in} \delta_{jk},
 \end{aligned} \tag{6.36}$$

тобто базис (6.32) є ортонормованим.

Примітка. Формулу (6.36) можна запам'ятати, якщо керуватися наступним правилом: **в ортонормованому базисі скалярний добуток дорівнює:**

- **одиниці**, якщо вирази зліва і справа від вертикальної риски **співпадають**
- **нулю**, якщо вирази зліва і справа від вертикальної риски **не співпадають**.

В загальному випадку стани підсистем 1 та 2, з яких складається система, **не можна** представити у вигляді певного чистого стану – навіть якщо сама система перебуває у чистому стані. Саме для опису таких ситуацій і потрібен формалізм матриці густини.

Зокрема, нехай система описується матрицею густини $\hat{\rho}$. Тоді підсистеми 1 та 2 описуються матрицями густини $\hat{\rho}_1$ та $\hat{\rho}_2$ відповідно, які будуються наступним чином:

$$\begin{aligned} (6.12) \Rightarrow \hat{\rho}_1 &= \text{Tr}_2 \hat{\rho} = \sum_n {}_2\langle n | \hat{\rho} | n \rangle_2 \\ (6.12) \Rightarrow \hat{\rho}_2 &= \text{Tr}_1 \hat{\rho} = \sum_k {}_1\langle k | \hat{\rho} | k \rangle_1, \end{aligned} \quad (6.37)$$

де Tr_2 означає частковий трейс по базисних станах лише підсистеми 2, а Tr_1 – по базисних станах лише підсистеми 1. При цьому компоненти іншої підсистеми (та, по які не береться частковий трейс) залишаються без змін.

Нехай оператор \hat{O}_1 визначений лише для підсистеми 1, а оператор \hat{O}_2 – лише для підсистеми 2. Тоді **середнє значення оператора \hat{O}_1 або \hat{O}_2** визначається як

$$\begin{aligned} \langle O_1 \rangle &= \text{Tr}_1 \hat{\rho}_1 \hat{O}_1 \\ \langle O_2 \rangle &= \text{Tr}_2 \hat{\rho}_2 \hat{O}_2, \end{aligned} \quad (6.38)$$

Примітка. Оскільки $\hat{\rho}_1, \hat{O}_1$ та $\hat{\rho}_2, \hat{O}_2$ визначені **лише** у просторі підсистем 1 та 2, то індекси біля трейсу в (6.38) можна опустити як наслідок того, що підпростір іншої підсистеми (2 та 1 відповідно) після взяття часткового трейсу жодним чином не впливатиме на результат.

Примітка. Середнє значення оператора \hat{O} , визначеного для **всієї** системи, знаходиться згідно (6.8), тобто

$$\langle O \rangle = \text{Tr} \hat{\rho} \hat{O}. \quad (6.39)$$

При цьому трейс береться по базисних станах **всієї** системи (наприклад, $\{|ij\rangle\}$).

Задача 169. Знайти матрицю густини системи, яка знаходиться у стані

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle - |11\rangle). \quad (6.40)$$

Розв'язок.

$$\begin{aligned} (6.35), (6.40) \Rightarrow \hat{\rho} &= \frac{1}{2} (|00\rangle - |11\rangle) (\langle 00| - \langle 11|) \\ &= \frac{1}{2} (|00\rangle \langle 00| - |00\rangle \langle 11| - |11\rangle \langle 00| + |11\rangle \langle 11|). \end{aligned} \quad (6.41)$$

Задача 170. Перевірити умову нормування для матриці густини (6.41).

Розв'язок.

$$\begin{aligned} (6.41) \Rightarrow \text{Tr } \hat{\rho} &= \text{Tr } \frac{1}{2} (|00\rangle \langle 00| - |00\rangle \langle 11| - |11\rangle \langle 00| + |11\rangle \langle 11|) \\ (6.32) \Rightarrow &= \frac{1}{2} \langle 00| (|00\rangle \langle 00| - |00\rangle \langle 11| - |11\rangle \langle 00| + |11\rangle \langle 11|) |00\rangle \\ &+ \frac{1}{2} \langle 01| (|00\rangle \langle 00| - |00\rangle \langle 11| - |11\rangle \langle 00| + |11\rangle \langle 11|) |01\rangle \\ &+ \frac{1}{2} \langle 10| (|00\rangle \langle 00| - |00\rangle \langle 11| - |11\rangle \langle 00| + |11\rangle \langle 11|) |10\rangle \\ &+ \frac{1}{2} \langle 11| (|00\rangle \langle 00| - |00\rangle \langle 11| - |11\rangle \langle 00| + |11\rangle \langle 11|) |11\rangle \\ (6.36) \Rightarrow &= \frac{1}{2} (1^2 - 1 \cdot 0 - 0 \cdot 1 + 0^2) \\ &+ \frac{1}{2} (0^2 - 0^2 - 0^2 + 0^2) \\ &+ \frac{1}{2} (0^2 - 0^2 - 0^2 + 0^2) \\ &+ \frac{1}{2} (0^2 - 0 \cdot 1 - 1 \cdot 0 + 1^2) \\ &= 1, \end{aligned} \quad (6.42)$$

отже умова нормування для $\hat{\rho}$ виконується.

Задача 171. Показати, що матриця густини (6.41) описує чистий стан системи.

Задача 172. Для стану (6.40) знайти матрицю густини першої підсистеми $\hat{\rho}_1$.

Розв'язок.

$$\begin{aligned}
 (6.37) \Rightarrow \quad \hat{\rho}_1 &= \text{Tr}_2 \hat{\rho} \\
 (6.37) \Rightarrow \quad &= {}_2\langle 0 | \hat{\rho} | 0 \rangle_2 + {}_2\langle 1 | \hat{\rho} | 1 \rangle_2 \\
 (6.41) \Rightarrow \quad &= \frac{1}{2} {}_2\langle 0 | \left(|0\rangle_1 |0\rangle_2 {}_1\langle 0| {}_2\langle 0| \right. \\
 &\quad - |0\rangle_1 |0\rangle_2 {}_1\langle 1| {}_2\langle 1| \\
 &\quad - |1\rangle_1 |1\rangle_2 {}_1\langle 0| {}_2\langle 0| \\
 &\quad \left. + |1\rangle_1 |1\rangle_2 {}_1\langle 1| {}_2\langle 1| \right) |0\rangle_2 \\
 &+ \frac{1}{2} {}_2\langle 1 | \left(|0\rangle_1 |0\rangle_2 {}_1\langle 0| {}_2\langle 0| \right. \\
 &\quad - |0\rangle_1 |0\rangle_2 {}_1\langle 1| {}_2\langle 1| \\
 &\quad - |1\rangle_1 |1\rangle_2 {}_1\langle 0| {}_2\langle 0| \\
 &\quad \left. + |1\rangle_1 |1\rangle_2 {}_1\langle 1| {}_2\langle 1| \right) |1\rangle_2 \\
 &= \frac{1}{2} \left(|0\rangle_1 {}_1\langle 0| {}_2\langle 0 | 0 \rangle_2 {}_2\langle 0 | 0 \rangle_2 \right. \\
 &\quad - |0\rangle_1 {}_1\langle 1| {}_2\langle 0 | 0 \rangle_2 {}_2\langle 1 | 0 \rangle_2 \\
 &\quad - |1\rangle_1 {}_1\langle 0| {}_2\langle 0 | 1 \rangle_2 {}_2\langle 0 | 0 \rangle_2 \\
 &\quad \left. + |1\rangle_1 {}_1\langle 1| {}_2\langle 0 | 1 \rangle_2 {}_2\langle 1 | 0 \rangle_2 \right) \\
 &+ \frac{1}{2} \left(|0\rangle_1 {}_1\langle 0| {}_2\langle 1 | 0 \rangle_2 {}_2\langle 0 | 1 \rangle_2 \right. \\
 &\quad - |0\rangle_1 {}_1\langle 1| {}_2\langle 1 | 0 \rangle_2 {}_2\langle 1 | 1 \rangle_2 \\
 &\quad - |1\rangle_1 {}_1\langle 0| {}_2\langle 1 | 1 \rangle_2 {}_2\langle 0 | 1 \rangle_2 \\
 &\quad \left. + |1\rangle_1 {}_1\langle 1| {}_2\langle 1 | 1 \rangle_2 {}_2\langle 1 | 1 \rangle_2 \right) \\
 (6.10) \Rightarrow \quad &= \frac{1}{2} (|0\rangle \langle 0| \cdot 1^2 - |0\rangle \langle 1| \cdot 1 \cdot 0 - |1\rangle \langle 0| \cdot 0 \cdot 1 + |1\rangle \langle 1| \cdot 0^2) \\
 &+ \frac{1}{2} (|0\rangle \langle 0| \cdot 0^2 - |0\rangle \langle 1| \cdot 0 \cdot 1 - |1\rangle \langle 0| \cdot 1 \cdot 0 + |1\rangle \langle 1| \cdot 1^2) \\
 &= \frac{1}{2} |0\rangle \langle 0| + \frac{1}{2} |1\rangle \langle 1| \\
 (6.11) \Rightarrow \quad &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix},
 \end{aligned}$$

(6.43)

де в останніх 4х рядках індекс $_1$ опущено, оскільки залишилася лише підсистема 1, див. Примітка після (6.38).

Примітка. Індекс $_2$ під час обчислення трейсу означає, що скалярні добутки беруться **лише** для других символів у векторах системи. Ті ж частини векторів, які відносяться до першої підсистеми, залишаються без змін, див. перехід від 3-го та 4-го рядків до відповідно 5-го та 6-го у (6.43).

Задача 173. Показати, що стан першої підсистеми (6.43) є змішаним.

Задача 174. Для стану (6.40) знайти матрицю густини другої підсистеми $\hat{\rho}_2$.

Задача 175. Побудувати матрицю густини для системи, яка перебуває в станах $|\psi_1\rangle$ та $|\psi_2\rangle$ з відповідними імовірностями p_1 та p_2 :

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= |00\rangle, & p_1 &= \frac{1}{4} \\ |\psi_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|01\rangle + i|10\rangle), & p_2 &= \frac{3}{4}. \end{aligned} \quad (6.44)$$

Розв'язок.

$$\begin{aligned} (6.2) \Rightarrow \hat{\rho} &= p_1 |\psi_1\rangle \langle\psi_1| + p_2 |\psi_2\rangle \langle\psi_2| \\ (6.35), (6.44) \Rightarrow &= \frac{1}{4} |00\rangle \langle 00| + \frac{3}{4} \frac{1}{2} (|01\rangle + i|10\rangle) (\langle 01| - i\langle 10|) \\ &= \frac{1}{4} |00\rangle \langle 00| + \frac{3}{8} |01\rangle \langle 01| - \frac{3i}{8} |01\rangle \langle 10| \\ &\quad + \frac{3i}{8} |10\rangle \langle 01| + \frac{3}{8} |10\rangle \langle 10|. \end{aligned} \quad (6.45)$$

Задача 176. Побудувати матрицю густини для системи, яка перебуває в станах $|\psi_1\rangle$ та $|\psi_2\rangle$ з відповідними імовірностями p_1 та p_2 :

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= |01\rangle, & p_1 &= \frac{2}{3} \\ |\psi_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} |00\rangle + i\sqrt{\frac{2}{3}} |01\rangle, & p_2 &= \frac{1}{3}. \end{aligned} \quad (6.46)$$

Розв'язок.

$$\begin{aligned}
(6.2) \Rightarrow &= p_1 |\psi_1\rangle \langle\psi_1| + p_2 |\psi_2\rangle \langle\psi_2| \\
(6.35), (6.46) \Rightarrow &= \frac{2}{3} |01\rangle \langle 01| \\
&+ \frac{1}{3} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} |00\rangle + i\sqrt{\frac{2}{3}} |01\rangle \right) \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \langle 00| - i\sqrt{\frac{2}{3}} \langle 01| \right) \\
&= \frac{2}{3} |01\rangle \langle 01| + \frac{1}{9} |00\rangle \langle 00| + i\frac{\sqrt{2}}{9} |01\rangle \langle 00| \\
&- i\frac{\sqrt{2}}{9} |00\rangle \langle 01| + \frac{2}{9} |01\rangle \langle 01| \\
&= \frac{1}{9} |00\rangle \langle 00| + i\frac{\sqrt{2}}{9} |01\rangle \langle 00| - i\frac{\sqrt{2}}{9} |00\rangle \langle 01| \\
&+ \frac{8}{9} |01\rangle \langle 01|.
\end{aligned} \tag{6.47}$$

Задача 177. З'ясувати, який стан – чистий чи змішаний – відповідає стану (6.46).

Задача 178. Для стану (6.46) знайти матрицю густини $\hat{\rho}_1$ першої підсистеми. Який стан – чистий чи змішаний – описує $\hat{\rho}_1$?

Розв'язок.

$$\begin{aligned}
(6.37) &\Rightarrow \hat{\rho}_1 = \text{Tr}_2 \hat{\rho} \\
(6.37) &\Rightarrow = {}_2\langle 0 | \hat{\rho} | 0 \rangle_2 + {}_2\langle 1 | \hat{\rho} | 1 \rangle_2 \\
(6.47) &\Rightarrow = \frac{1}{9} {}_2\langle 0 | \left(|0\rangle_1 |0\rangle_2 {}_1\langle 0 | {}_2\langle 0 | \right. \\
&\quad + i\sqrt{2} |0\rangle_1 |1\rangle_2 {}_1\langle 0 | {}_2\langle 0 | \\
&\quad - i\sqrt{2} |0\rangle_1 |0\rangle_2 {}_1\langle 0 | {}_2\langle 1 | \\
&\quad \left. + 8 |0\rangle_1 |1\rangle_2 {}_1\langle 0 | {}_2\langle 1 | \right) |0\rangle_2 \\
&\quad + \frac{1}{9} {}_2\langle 1 | \left(|0\rangle_1 |0\rangle_2 {}_1\langle 0 | {}_2\langle 0 | \right. \\
&\quad + i\sqrt{2} |0\rangle_1 |1\rangle_2 {}_1\langle 0 | {}_2\langle 0 | \\
&\quad - i\sqrt{2} |0\rangle_1 |0\rangle_2 {}_1\langle 0 | {}_2\langle 1 | \\
&\quad \left. + 8 |0\rangle_1 |1\rangle_2 {}_1\langle 0 | {}_2\langle 1 | \right) |1\rangle_2 \\
&= \frac{1}{9} \left(|0\rangle_1 {}_1\langle 0 | {}_2\langle 0 | 0 \rangle_2 {}_2\langle 0 | 0 \rangle_2 \right. \\
&\quad + i\sqrt{2} |0\rangle_1 {}_1\langle 0 | {}_2\langle 0 | 1 \rangle_2 {}_2\langle 0 | 0 \rangle_2 \\
&\quad - i\sqrt{2} |0\rangle_1 {}_1\langle 0 | {}_2\langle 0 | 0 \rangle_2 {}_2\langle 1 | 0 \rangle_2 \\
&\quad \left. + 8 |0\rangle_1 {}_1\langle 0 | {}_2\langle 0 | 1 \rangle_2 {}_2\langle 1 | 0 \rangle_2 \right) \\
&\quad + \frac{1}{9} \left(|0\rangle_1 {}_1\langle 0 | {}_2\langle 1 | 0 \rangle_2 {}_2\langle 0 | 1 \rangle_2 \right. \\
&\quad + i\sqrt{2} |0\rangle_1 {}_1\langle 0 | {}_2\langle 1 | 1 \rangle_2 {}_2\langle 0 | 1 \rangle_2 \\
&\quad - i\sqrt{2} |0\rangle_1 {}_1\langle 0 | {}_2\langle 1 | 0 \rangle_2 {}_2\langle 1 | 1 \rangle_2 \\
&\quad \left. + 8 |0\rangle_1 {}_1\langle 0 | {}_2\langle 1 | 1 \rangle_2 {}_2\langle 1 | 1 \rangle_2 \right) \\
(6.10) &\Rightarrow = \frac{1}{9} \left(|0\rangle \langle 0 | \cdot 1^2 + i\sqrt{2} |0\rangle \langle 0 | \cdot 0 \cdot 1 - i\sqrt{2} |0\rangle \langle 0 | \cdot 1 \cdot 0 \right. \\
&\quad \left. + 8 |0\rangle \langle 0 | \cdot 0^2 \right) \\
&\quad + \frac{1}{9} \left(|0\rangle \langle 0 | \cdot 0^2 + i\sqrt{2} |0\rangle \langle 0 | \cdot 1 \cdot 0 - i\sqrt{2} |0\rangle \langle 0 | \cdot 0 \cdot 0 \right. \\
&\quad \left. + \frac{8}{9} |0\rangle \langle 0 | \cdot 1^2 \right) \\
&= \frac{1}{9} |0\rangle \langle 0 | + \frac{8}{9} |0\rangle \langle 0 | \\
&= |0\rangle \langle 0 |,
\end{aligned} \tag{6.48}$$

де в останніх би рядках індекс $_1$ опущено, оскільки залишилася лише

підсистема 1, див. Примітка після (6.38).

Перевірка чистоти стану першої підсистеми:

$$\begin{aligned}
 (6.48) \Rightarrow \quad (\hat{\rho}_1)^2 &= (|0\rangle \langle 0|)^2 \\
 &= |0\rangle \langle 0| 0\rangle \langle 0| \\
 (6.10) \Rightarrow \quad &= |0\rangle \langle 0| \\
 (6.48) \Rightarrow \quad &= \hat{\rho}_1 \\
 &\Downarrow \\
 \text{Tr } (\hat{\rho}_1)^2 &= \text{Tr } \hat{\rho}_1.
 \end{aligned} \tag{6.49}$$

Отже, перша підсистема перебуває в чистому стані.

Задача 179. Для стану (6.46) знайти матрицю густини $\hat{\rho}_2$ другої підсистеми. Який стан – чистий чи змішаний – описує $\hat{\rho}_2$?

Задача 180. Знайти середнє значення $\langle A \rangle$ оператора

$$\hat{A} = |00\rangle \langle 11| - |11\rangle \langle 00| + a |01\rangle \langle 10| + b |10\rangle \langle 01|, \quad a, b \in \mathbb{C} \tag{6.50}$$

у стані, який описується матрицею густини (6.41). Чому $\langle A \rangle$ не залежить від значення сталих a та b ?