Содержание

1 Две частицы в поле Гука

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{\partial^2\psi}{\partial x_1^2}-\frac{\hbar^2}{2m_2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x_2^2}+\frac{\kappa(x_1-x_2)^2}{2}\psi=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

Введём координаты:

$$\eta = x_1 - x_2$$

$$\xi = \frac{m_1x_1+m_2x_2}{m_1+m_2}$$

$$x_1 = \xi + \frac{m_2}{m_1+m_2}\eta$$

$$x_2 = \xi - \frac{m_1}{m_1+m_2}\eta$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial x_1}=\frac{\partial\psi}{\partial\eta}\frac{\partial\eta}{\partial x_1}+\frac{\partial\psi}{\partial\xi}\frac{\partial\xi}{\partial x_1}=\frac{\partial\psi}{\partial\eta}+\frac{m_1}{m_1+m_2}\frac{\partial\psi}{\partial\xi}$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial x_2}=\frac{\partial\psi}{\partial\eta}\frac{\partial\eta}{\partial x_2}+\frac{\partial\psi}{\partial\xi}\frac{\partial\xi}{\partial x_2}=-\frac{\partial\psi}{\partial\eta}+\frac{m_2}{m_1+m_2}\frac{\partial\psi}{\partial\xi}$$

$$\frac{1}{m_1}\frac{\partial^2\psi}{\partial x_1^2}=\frac{1}{m_1}\frac{\partial^2\psi}{\partial\eta^2}+\frac{2}{m_1+m_2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\xi\partial\eta}+\frac{m_1}{(m_1+m_2)^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\xi^2}$$

$$\frac{1}{m_2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x_2^2}=\frac{1}{m_2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\eta^2}-\frac{2}{m_1+m_2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\xi\partial\eta}+\frac{m_2}{(m_1+m_2)^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\xi^2}$$

$$\frac{1}{m_1}\frac{\partial^2\psi}{\partial x_1^2}+\frac{1}{m_2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x_2^2}=\frac{m_1+m_2}{m_1m_2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\eta^2}+\frac{1}{m_1+m_2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\xi^2}$$

Вводим

$$M=\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}\quad \kappa=M\omega^2$$

Отсюда следует:

$$\psi=\sum_{n=0}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}A_n(p_\xi)e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p_\xi^2}{2(m_1+m_2)}t-p_\xi\xi\right)}dp_\xi\cdot H_n\left(\sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}}\eta\right)\exp\left(-\frac{M\omega\eta^2}{2\hbar}\right)e^{i\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)t}$$

2 Нормальные координаты. Классический случай

Гамильтониан:

$$H=\sum_{i=1}^{N}\frac{p_i'^2}{2m_i}+\sum_{i,j}\frac{A'_{ij}q'_iq'_j}{2}$$

Вводим новые обозначения:

$$q_i=\sqrt{m_i}q'_i$$

$$A_{ij}=\frac{A'_{ij}}{\sqrt{m_im_j}}$$

$$p_i=\frac{\partial L}{\partial\dot q_i}=\frac{p'_i}{\sqrt{m_i}}$$

Гамильтониан в новых координатах:

$$H=\sum_{i=1}^{N}\frac{p_i^2}{2}+\sum_{i,j}\frac{A_{ij}q_iq_j}{2}$$

Уравнения движения (всегда можно выбрать A_{ij} так, что$A_{ij}=A_{ji}$):

$$\dot p_k=-\sum_{i,j}\frac{A_{ij}\delta_{ik}q_j+A_{ij}q_i\delta_{jk}}{2}=-\sum_i A_{ki}q_i$$

$$\dot q_k=p_k$$

Подставляем второе в первое и получаем:

$$\ddot q_k=-\sum_i A_{ki}q_i$$

Приводим систему к нормальным координатам. Для этого находим собственные числа $-\omega_n^2$ и матрицу собственных векторов $C(c_{in})$, матрицы $-A$:

$$\det(-\omega^2\delta_{ij} + A_{ij}) = 0$$

$$\sum_i A_{ki}c_{in} = \omega_n^2 c_{kn}$$

Матрица собственных векторов в силу симметричности A, можно выбрать такую, что она будет ортогональна:

$$C^{-1} = C^T$$

$$\sum_i c_{ik}c_{in} = \sum_i c_{ki}c_{ni} = \delta_{kn}$$

Вводим новые переменные:

$$P_i = p_i$$

$$Q_i = \sum_j c_{ij}q_j$$

Получаем для гамильтониана:

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{P_i^2}{2} + \sum_{k,n}\sum_{i,j}\frac{1}{2}c_{ik}A_{ij}c_{jn}Q_kQ_n = \sum_{i=1}^N \frac{P_i^2}{2} + \sum_{k,n}\frac{1}{2}\omega_n^2\delta_{nk}Q_kQ_n$$

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{P_i^2}{2} + \frac{\omega_i^2Q_i^2}{2}$$

3 Нормальные координаты. Квантовый случай

В квантовом случае импульс в декартовых координатах:

$$\hat{p}'_i = -i\hbar\frac{\partial}{\partial q'_i}$$

При первом преобразовании координат, как легко видеть:

$$\hat{p}_i = -i\hbar\frac{\partial}{\partial q_i}$$

Поэтому гамильтониан:

$$\hat{H} = \sum_i -\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial}{\partial q_i}\frac{\partial}{\partial q_i} + \frac{\omega_i^2Q_i^2}{2} = \sum_i -\frac{\hbar^2}{2}\sum_n\frac{\partial Q_n}{\partial q_i}\frac{\partial}{\partial Q_n}\sum_k\frac{\partial Q_k}{\partial q_i}\frac{\partial}{\partial Q_k} + \frac{\omega_i^2Q_i^2}{2} =$$

$$= \sum_i -\frac{\hbar^2}{2}\sum_n c_{ni}\frac{\partial}{\partial Q_n}\sum_k c_{ki}\frac{\partial}{\partial Q_k} + \frac{\omega_i^2Q_i^2}{2} = \sum_{k,n} -\frac{\hbar^2}{2}\sum_i c_{ni}c_{ki}\frac{\partial^2}{\partial Q_n\partial Q_k} + \sum_i\frac{\omega_i^2Q_i^2}{2} =$$

$$= \sum_i -\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial Q_i^2} + \frac{\omega_i^2Q_i^2}{2}$$

4 Сферические координаты

Связь декартовых (x, y, z) и сферических координат (r, θ, α) даётся выражениями:

$$x = r\sin\theta\cos\alpha$$
$$y = r\sin\theta\sin\alpha$$
$$z = r\cos\theta$$

Орты сферической системы координат найдём из соотношений:

$$\left|\frac{\partial\vec{r}}{\partial r}\right|\vec{e}_r = \frac{\partial\vec{r}}{\partial r} = \sin\theta\cos\alpha\,\vec{e}_x + \sin\theta\sin\alpha\,\vec{e}_y + \cos\theta\,\vec{e}_z$$

$$\left|\frac{\partial\vec{r}}{\partial\theta}\right|\vec{e}_\theta = \frac{\partial\vec{r}}{\partial\theta} = r\cos\theta\cos\alpha\,\vec{e}_x + r\cos\theta\sin\alpha\,\vec{e}_y - r\sin\theta\,\vec{e}_z$$

$$\left|\frac{\partial\vec{r}}{\partial\alpha}\right|\vec{e}_\alpha = \frac{\partial\vec{r}}{\partial\alpha} = -r\sin\theta\sin\alpha\,\vec{e}_x + r\sin\theta\cos\alpha\,\vec{e}_y$$

Коэффициенты Ламе:

$$H_r = \left|\frac{\partial \vec{r}}{\partial r}\right| = 1$$

$$H_\theta = \left|\frac{\partial \vec{r}}{\partial \theta}\right| = r$$

$$H_\alpha = \left|\frac{\partial \vec{r}}{\partial \alpha}\right| = r \sin\theta$$

Орты

$$\vec{e}_r = \sin\theta\cos\alpha\,\vec{e}_x + \sin\theta\sin\alpha\,\vec{e}_y + \cos\theta\,\vec{e}_z$$
$$\vec{e}_\theta = \cos\theta\cos\alpha\,\vec{e}_x + \cos\theta\sin\alpha\,\vec{e}_y - \sin\theta\,\vec{e}_z$$
$$\vec{e}_\alpha = -\sin\alpha\,\vec{e}_x + \cos\alpha\,\vec{e}_y$$

Орты декартовой системы, выраженные через орты сферической системы:

$$\vec{e}_x = \sin\theta\cos\alpha\,\vec{e}_r + \cos\theta\cos\alpha\,\vec{e}_\theta - \sin\alpha\,\vec{e}_\alpha$$
$$\vec{e}_y = \sin\theta\sin\alpha\,\vec{e}_r + \cos\theta\sin\alpha\,\vec{e}_\theta + \cos\alpha\,\vec{e}_\alpha$$
$$\vec{e}_z = \cos\theta\,\vec{e}_r - \sin\theta\,\vec{e}_\theta$$

Немного о производных от ортов (для вывода нужно помнить, что орты декартовой системы образуют базис, не зависящий от его положения, в то время как орты сферической системы образуют базис, который меняется от точки к точке):

$$\begin{array}{lll}
\dfrac{\partial \vec{e}_r}{\partial r} = 0 & \dfrac{\partial \vec{e}_\theta}{\partial r} = 0 & \dfrac{\partial \vec{e}_\alpha}{\partial r} = 0 \\
\dfrac{\partial \vec{e}_r}{\partial \theta} = \vec{e}_\theta & \dfrac{\partial \vec{e}_\theta}{\partial \theta} = -\vec{e}_r & \dfrac{\partial \vec{e}_\alpha}{\partial \theta} = 0 \\
\dfrac{\partial \vec{e}_r}{\partial \alpha} = \sin\theta\,\vec{e}_\alpha & \dfrac{\partial \vec{e}_\theta}{\partial \alpha} = \cos\theta\,\vec{e}_\alpha & \dfrac{\partial \vec{e}_\alpha}{\partial \alpha} = -\sin\theta\,\vec{e}_r - \cos\theta\,\vec{e}_\theta
\end{array}$$

5 Волновые функции в p и x представлениях

Для описания квантовых процессов вводят волновые функции, которые являются суперпозициями волн д'Бройля. Для одной частицы:

$$\psi(\vec{r},t) = A\int C_(\vec{p},t)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)d^3p$$

$$C(\vec{p},t) = B\int \psi(\vec{r},t)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)d^3r$$

$\psi(\vec{r},t)$ – волновая функция в x представлении. $C(\vec{p},t)$ – волновая функция в p представлении. A и B – действительные числа, которые можно найти из условия нормировки. Нормировка:

$$\int \psi^*(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t)d^3r = \int C^*(\vec{p},t)C(\vec{p},t)d^3p = 1$$

$$A^2\iint C^*(\vec{p'},t)C(\vec{p},t)\exp\left(\frac{i}{\hbar}(\vec{p'}-\vec{p})\cdot\vec{r}\right)d^3p\,d^3p'\,d^3r =$$
$$= A^2\int C^*(\vec{p'},t)C(\vec{p},t)(2\pi\hbar)^3\delta(\vec{p'}-\vec{p})d^3p\,d^3p' =$$
$$= A^2(2\pi\hbar)^3\int C^*(\vec{p},t)C(\vec{p},t)d^3p = A^2(2\pi\hbar)^3 = 1$$

$$B^2\iint \psi^*(\vec{r'},t)\psi(\vec{r},t)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot(\vec{r'}-\vec{r})\right)d^3p\,d^3r\,d^3r' =$$
$$= B^2(2\pi\hbar)^3\iint \psi^*(\vec{r'},t)\psi(\vec{r},t)\delta(\vec{r'}-\vec{r})d^3r\,d^3r' = B^2(2\pi\hbar)^3\iint \psi^*(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t)d^3r =$$
$$= B^2(2\pi\hbar)^3 = 1$$

$$A = B = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$$

Обратимость непосредственно следует из обратимости преобразования Фурье.

6 Оператор импульса в x представлении

Оператор импульса в p представлении, просто вектор $\vec{p}$. По определению оператор импульса $\hat{\vec{p}}$ в x представлении:

$$\langle\vec{p}\rangle = \int \psi^*(\vec{r},t)\hat{\vec{p}}\psi(\vec{r},t)d^3r$$

Средний импульс:

$$\langle\vec{p}\rangle = \int C^*(\vec{p},t)\vec{p}C(\vec{p},t)d^3p =$$
$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\iiint \vec{p}\psi^*(\vec{r'},t)\psi(\vec{r},t)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot(\vec{r'}-\vec{r})\right)d^3r'\,d^3r\,d^3p =$$
$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\iint \psi^*(\vec{r'},t)\psi(\vec{r},t)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\vec{r'}}\int \exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot(\vec{r'}-\vec{r})\right)d^3p\,d^3r'\,d^3r =$$
$$= \iint \psi^*(\vec{r'},t)\psi(\vec{r},t)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\vec{r'}}\delta(\vec{r'}-\vec{r})d^3r'\,d^3r =$$
$$= [\text{интегрируем по частям и учитываем, что } \psi = 0 \text{ на } \infty] =$$
$$= -\frac{\hbar}{i}\iint \delta(\vec{r'}-\vec{r})\frac{\partial}{\partial\vec{r'}}\psi^*(\vec{r'},t)\psi(\vec{r},t)d^3r'\,d^3r =$$
$$= -\frac{\hbar}{i}\int \psi(\vec{r},t)\frac{\partial}{\partial\vec{r}}\psi^*(\vec{r},t)d^3r =$$
$$= [\text{ещё одно интегрирование по частям}] =$$
$$= \frac{\hbar}{i}\int \psi^*(\vec{r},t)\frac{\partial}{\partial\vec{r}}\psi(\vec{r},t)d^3r$$
$$\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\vec{r}} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{r}}$$

7 Оператор координаты в p представлении

Оператор координаты в x представлении $\vec{r}$. В p представлении по определению:

$$\langle\vec{r}\rangle = \int C^*(\vec{p},t)\hat{\vec{r}}C(\vec{p},t)d^3p$$

Итак:

$$\langle\vec{r}\rangle = \int \psi^*(\vec{r},t)\vec{r}\psi(\vec{r},t)d^3r =$$
$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\iiint C^*(\vec{p'},t)C(\vec{p},t)\vec{r}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}(\vec{p'}-\vec{p})\cdot\vec{r}\right)d^3r\,d^3p\,d^3p' =$$
$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\iint C^*(\vec{p'},t)C(\vec{p},t)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\vec{p}}\int \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p'})\cdot\vec{r}\right)d^3r\,d^3p\,d^3p' =$$
$$= \frac{\hbar}{i}\iint C^*(\vec{p'},t)C(\vec{p},t)\frac{\partial}{\partial\vec{p}}\delta(\vec{p}-\vec{p'})d^3p\,d^3p' =$$
$$= [\text{интегрируем по частям и учитываем, что } C = 0 \text{ на } \infty] =$$
$$= -\frac{\hbar}{i}\iint C^*(\vec{p},t)\frac{\partial}{\partial\vec{p}}C(\vec{p},t)d^3p$$

В результате:

$$\hat{\vec{r}} = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\vec{p}} = i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{p}}$$

Уравнение Шрёдингера сохраняет свою форму:

$$\sum_{i=1}^{N}\frac{p_i^2}{2m_i}C + \hat{U}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p_1},\ldots,i\hbar\frac{\partial}{\partial p_N}\right)C = i\hbar\frac{\partial C}{\partial t}$$

8 Определение и некоторые свойства функций Эйри

Функциями Эйри называют:

$$\mathrm{Ai}\,(x) = \frac{1}{\pi}\int\limits_0^\infty \cos\left(\frac{t^3}{3}+xt\right)dt$$

$$\mathrm{Bi}\,(x) = \frac{1}{\pi}\int\limits_0^\infty \left[e^{-\frac{1}{3}t^3 - xt} + \sin\left(\frac{t^3}{3} + xt\right)\right] dt$$

Асимптотика (можно найти, проинтегрировав методом перевала в комплексной плоскости):

$$\mathrm{Ai}\,(x) \underset{x\to\infty}{\approx} \frac{1}{2\sqrt{\pi}x^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}x^{3/2}\right)$$

$$\mathrm{Bi}\,(x) \underset{x\to\infty}{\approx} \frac{1}{\sqrt{\pi}x^{1/4}} \exp\left(\frac{2}{3}x^{3/2}\right)$$

$$\mathrm{Ai}\,(x) \underset{x\to-\infty}{\approx} \frac{1}{\sqrt{\pi}x^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}|x|^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right)$$

$$\mathrm{Bi}\,(x) \underset{x\to-\infty}{\approx} \frac{1}{\sqrt{\pi}x^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}|x|^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right)$$

Интеграл (легко находится с использованием дельта функции)

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{Ai}\,(x)\, dx = 1$$

Функции Эйри удовлетворяют уравнению Эйри:

$$u'' - xu = 0$$

Рассмотрим интеграл:

$$\int\limits_a^\infty \mathrm{Ai}'(x)\,\mathrm{Ai}''(x)dx = \int\limits_a^\infty x\,\mathrm{Ai}'(x)\,\mathrm{Ai}\,(x)dx$$

$$\Rightarrow \frac{\left[\,\mathrm{Ai}'(x)\right]^2}{2}\Bigg|_a^\infty = x\frac{\left[\,\mathrm{Ai}\,(x)\right]^2}{2}\Bigg|_a^\infty - \int\limits_a^\infty \frac{\left[\,\mathrm{Ai}\,(x)\right]^2}{2}dx$$

Откуда следует весьма важный интеграл:

$$\int\limits_a^\infty \left[\,\mathrm{Ai}\,(x)\right]^2 dx = \left[\,\mathrm{Ai}'(a)\right]^2 - a\left[\,\mathrm{Ai}\,(a)\right]^2$$

9 Решение линейных уравнений

Поставим следующую задачу:

$$L\,[y] = \frac{\partial y}{\partial t}$$

$$y(x,t)\Big|_{t=0} = y(x,0)$$

L – произвольный линейный оператор. Пусть собственные значения $Y(x,\lambda)$ удовлетворяет уравнению:

$$L\,[Y] = \lambda Y$$

и если спектр λ сплошной, существует функция $Y^{-1}(x,\lambda')$, такая что:

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} Y^{-1}(x,\lambda')Y(x,\lambda)dx = \delta(\lambda-\lambda')$$

Будем искать y в виде:

$$y = \int\limits_{-\infty}^{\infty} A(\lambda)e^{\lambda t}Y(x,\lambda)\, d\lambda$$

Простой подстановкой можно проверить, что это выражение в самом деле является решением уравнения. $A(\lambda)$ определим из начальных условий:

$$y(x,0) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} A(\lambda)Y(x,\lambda)\, d\lambda$$

$$A(\lambda) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} y(x,0) Y^{-1}(x,\lambda)\, dx$$

Подставляем в решение и получаем:

$$y(x,t) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} y(x',0) \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{\lambda t} Y^{-1}(x',\lambda) Y(x,\lambda)\, d\lambda\, dx'$$

10 Решение линейных уравнений в случае дискретного спектра

В случае дискретного спектра у нас есть система функций:

$$Y_1(x), Y_2(x), \ldots, Y_n(x), \ldots$$

и соответствующая ей последовательность чисел:

$$\lambda_1, \lambda_2, \ldots$$

Если удалось построить дополнительную систему функций

$$Y_1^{-1}(x), Y_2^{-1}(x), \ldots, Y_n^{-1}(x), \ldots$$

такую что

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} Y_k^{-1}(x) Y_n(x) dx = \delta_{kn}$$

То решение уравнения можно найти в виде:

$$y = \sum_{k=1}^{\infty} A_k e^{\lambda_k t} Y_k(x)$$

$$A_k = \int\limits_{-\infty}^{\infty} Y_k^{-1}(x) y(x,0) dx$$

Получаем окончательно решение:

$$y(x,t) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} y(x',0) \sum_{k=1}^{\infty} e^{\lambda_k t} Y_k^{-1}(x') Y_k(x) dx'$$

11 Частица в однородном силовом поле

Пусть сила, действующая на частицу, равна F по модулю и направлена вдоль оси z в обратном направлении. Гамильтониан в классическом случае:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + F\hat{z}$$

Уравнение Шрёдингера:

$$\frac{p_z^2}{2m} C(p_z,t) + i\hbar F \frac{\partial C(p_z,t)}{\partial p_z} = i\hbar \frac{\partial C(p_z,t)}{\partial t}$$

Вместо λ будет выступать $-iE/\hbar$. Для Y получаем уравнение

$$\frac{p_z^2}{2m} Y + i\hbar F \frac{\partial Y}{\partial p_z} = EY$$

Будем искать Y в форме $\exp f(p_z)$:

$$i\hbar F \frac{\partial f(p_z)}{\partial p_z} = E - \frac{p_z^2}{2m}$$

$$f(p_z) = -i\frac{E}{\hbar F} p_z + i\frac{1}{6m\hbar F} p_z^3 + const$$

Константа уйдёт в нормировочный множитель.

$$Y(p_z,E) = A \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{E}{F} p_z - \frac{1}{6mF} p_z^3\right)\right)$$

$$Y^{-1}(p_z, E) = B \exp\left(\frac{i}{\hbar}\left(\frac{E}{F}p_z - \frac{1}{6mF}p_z^3\right)\right)$$

$$AB\int\limits_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{ip_z}{\hbar F}(E' - E)\right) dp_z = 2\pi AB\hbar F\,\delta(E' - E) = \delta(E' - E)$$

Откуда можно в качестве A и B можно взять константы:

$$A = B = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar F}}$$

$$C(p_z, t) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} C(p_z, 0) \int\limits_{-\infty}^{\infty} AB \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\left(E\left(\frac{p_z - p_z'}{F} + t\right) - \frac{1}{6mF}(p_z^3 - p_z'^3)\right)\right) dE\, dp_z' =$$

$$= \int\limits_{-\infty}^{\infty} C(p_z', 0)\delta(p_z - p_z' + Ft) \exp\left(\frac{i}{6m\hbar F}(p_z^3 - p_z'^3)\right) dp_z' =$$

$$= C(p_z + Ft, 0) \exp\left(\frac{i(-3p_z^2 Ft - 3p_z F^2 t^2 - F^3 t^3)}{6m\hbar F}\right) =$$

$$= C(p_z + Ft, 0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p_z^2}{2m}t + \frac{p_z F t^2}{2m} + \frac{F^2 t^3}{6m}\right)\right)$$

Чтобы получить дискретный спектр нужно ввести дополнительные условия. Чаще всего таким условием выступает поверхность, за пределы которой частица не может попасть. В качестве такой поверхности может выступать поверхность Земли для поля тяжести, обкладка конденсатора.

12 Гауссовский волновой пакет в однородном поле

Пусть

$$\psi(z, 0) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(z - z_0)^2}{4\sigma^2}\right)$$

$$C(p_z, 0) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma^2}} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{(z - z_0)^2}{4\sigma^2} - \frac{i}{\hbar}p_z z\right) dz =$$

$$= \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma^2}} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}p_z z_0\right) \int\limits_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{(z - z_0)^2}{4\sigma^2} - \frac{i}{\hbar}p_z(z - z_0)\right) dz =$$

$$= \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma^2}} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}p_z z_0\right) \int\limits_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{(z - z_0)^2}{4\sigma^2} - 2\frac{i}{\hbar}\sigma p_z \frac{(z - z_0)}{2\sigma}\right) dz =$$

$$= \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma^2}} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}p_z z_0\right) \int\limits_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\left(\frac{(z - z_0)}{2\sigma} + \frac{i}{\hbar}\sigma p_z\right)^2 - \frac{\sigma^2 p_z^2}{\hbar^2}\right) dz =$$

$$= \frac{2\sqrt[4]{2\pi\sigma^2}}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}p_z z_0 - \frac{\sigma^2 p_z^2}{\hbar^2}\right) =$$

$$= \sqrt[4]{\frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}p_z z_0 - \frac{\sigma^2 p_z^2}{\hbar^2}\right)$$

$$\langle z \rangle = \sqrt{\frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \left(z_0 - \frac{2i\hbar\sigma^2}{\hbar^2}(p_z + Ft) + \frac{p_z}{m}t + \frac{Ft^2}{2m}\right) \exp\left(-\frac{2\sigma^2(p_z + Ft)^2}{\hbar^2}\right) dp_z =$$

$$= \sqrt{\frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \left(z_0 - \frac{2i\hbar\sigma^2}{\hbar^2}(p_z + Ft) + \frac{p_z + Ft}{m}t - \frac{Ft^2}{2m}\right) \exp\left(-\frac{2\sigma^2(p_z + Ft)^2}{\hbar^2}\right) dp_z =$$

$$= z_0 - \frac{Ft^2}{2m}$$

$$\langle z^2\rangle = \sqrt{\frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\left(z_0 - \frac{Ft^2}{2m} + \left(\frac{t}{m} - 2\frac{i\sigma^2}{\hbar}\right)(p_z + Ft)\right)^2 \exp\left(-\frac{2\sigma^2(p_z+Ft)^2}{\hbar^2}\right)dp_z +$$

$$+\sqrt{\frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\left(2\sigma^2 + \frac{i\hbar}{m}t\right)\exp\left(-\frac{2\sigma^2(p_z+Ft)^2}{\hbar^2}\right)dp_z =$$

$$= \left(z_0 - \frac{Ft^2}{2m}\right)^2 + \left(\frac{t}{m} - 2\frac{i\sigma^2}{\hbar}\right)^2\frac{\hbar^2}{4\sigma^2} + \left(2\sigma^2 + \frac{i\hbar}{m}t\right) =$$

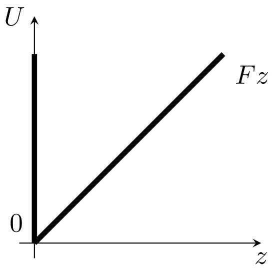
$$= \left(z_0 - \frac{Ft^2}{2m}\right)^2 + \frac{t^2\hbar^2}{4m^2\sigma^2} + \sigma^2$$

Дисперсия:

$$\langle z^2\rangle - \langle z\rangle^2 = \frac{t^2\hbar^2}{4m^2\sigma^2} + \sigma^2$$

13 Частица в однородном поле над непроницаемым барьером

Рассмотрим частицу в треугольной потенциальной яме:



В этом случае спектр дискретный. Нам необходимо от импульсной формы перейти к координатной. В этом случае получится обычное стационарное уравнение Шрёдингера с решением:

$$\psi(z,E) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} A\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{E-Fz}{F}p_z - \frac{1}{6mF}p_z^3\right)\right)dp_z =$$

$$= \int\limits_{-\infty}^{\infty} A\cos\left(-\frac{E-Fz}{F\hbar}p_z + \frac{1}{2mF\hbar}\frac{p_z^3}{3}\right)dp_z =$$

$$= A(2mF\hbar)^{1/3}\,\mathrm{Ai}\left((2mF\hbar)^{1/3}\frac{Fz-E}{F\hbar}\right)$$

Зная корни функции Эйри $x_1, x_2, \ldots$, легко найти спектр:

$$E_k = -(2m)^{-1/3}\hbar^{2/3}F^{2/3}x_k$$

А воспользовавшись интегралом:

$$\int\limits_{x_k}^{\infty}\mathrm{Ai}^2(x)\,dx = \left[\,\mathrm{Ai}'(x_k)\right]^2,$$

нормировочную константу:

$$A = \hbar^{-2/3}(2mF)^{-1/6}|\,\mathrm{Ai}'(x_k)|^{-1}$$

Окончательно волновые функции:

$$\psi_k(z) = \frac{(2mF)^{1/6}}{\hbar^{1/3}|\,\mathrm{Ai}'(x_k)|}\,\mathrm{Ai}\left((2mF\hbar)^{1/3}\frac{z}{\hbar} + x_k\right)$$

Для электронов:

$$E_k \approx -1{,}14\times 10^6 F^{2/3}x_k \text{ эВ}$$

Найдём количество значений x_k приходящийся в интервал $(k_bT, k_b(T+\Delta T))$ при $\Delta T = 10$K и $T = 300$K (обозначим эту величину N) для поля силы тяжести, что соответствует частице над поверхностью Земли. Для этого воспользуемся приближённым выражением:

$$\mathrm{Ai}\,(x) \underset{x\to-\infty}{\approx} \frac{1}{\sqrt{\pi}x^{1/4}}\sin\left(\frac{2}{3}|x|^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right)$$

$$|x_k|^{3/2} \approx \frac{3}{2}\pi k - \frac{3\pi}{8}$$

$$N \approx \frac{2^{3/2}}{3\pi g\hbar m^{1/2}} k_b^{3/2} T^{3/2} ((1+\Delta T/T)^{3/2} - 1) \approx \frac{2^{1/2}}{\pi g\hbar m^{1/2}} k_b^{3/2} T^{1/2} \Delta T$$

Для электронов:

$$N \approx 4{,}07 \times 10^{15}$$

Далее можно приближённо вычислить среднюю температуру таких частиц и так далее.

14 Оператор импульса в сферических координатах и коммутационные соотношения

Нам известно, что оператор импульса это градиент с коэффициентом. Градиент в сферических координатах:

$$\nabla = \left\{ \frac{\partial}{\partial r}, \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}, \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \alpha} \right\}$$

Оператор Лапласа, который фигурирует в уравнении Шрёдингера:

$$\Delta = \nabla \cdot \nabla = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2}$$

Но умные люди давно подсчитали, что:

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2}$$

и результаты, вообще говоря, не совпадают. Где мы ошиблись? Ответ на этот вопрос чрезвычайно прост: мы не должны были забывать об ортах. Запишем градиент иначе:

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

И воспользуемся формулами:

$$\begin{array}{lll}
\dfrac{\partial \vec{e}_r}{\partial r} = 0 & \dfrac{\partial \vec{e}_\theta}{\partial r} = 0 & \dfrac{\partial \vec{e}_\alpha}{\partial r} = 0 \\
\dfrac{\partial \vec{e}_r}{\partial \theta} = \vec{e}_\theta & \dfrac{\partial \vec{e}_\theta}{\partial \theta} = -\vec{e}_r & \dfrac{\partial \vec{e}_\alpha}{\partial \theta} = 0 \\
\dfrac{\partial \vec{e}_r}{\partial \alpha} = \sin\theta\, \vec{e}_\alpha & \dfrac{\partial \vec{e}_\theta}{\partial \alpha} = \cos\theta\, \vec{e}_\alpha & \dfrac{\partial \vec{e}_\alpha}{\partial \alpha} = -\sin\theta\, \vec{e}_r - \cos\theta\, \vec{e}_\theta
\end{array}$$

Тогда

$$\begin{gathered}
\Delta = \vec{e}_r \cdot \frac{\partial}{\partial r}\left(\vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\alpha \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \alpha}\right) + \\
+ \vec{e}_\theta \cdot \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\alpha \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \alpha}\right) + \vec{e}_\alpha \cdot \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \alpha}\left(\vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\alpha \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \alpha}\right) = \\
= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} = \\
= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2}
\end{gathered}$$

Итак, оператор импульса в сферических координатах:

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\left(\vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\alpha \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \alpha}\right)$$

Соотношения коммутации в случае декартовых координат:

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = \hat{p}_i\hat{p}_j - \hat{p}_j\hat{p}_i = 0$$

С точки зрения векторов это означает, что в терминах полного произведения векторов матрица $\hat{\vec{p}}\hat{\vec{p}}$ симметрична.

$$\begin{gathered}
\nabla\nabla = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r}\left(\vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\alpha \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \alpha}\right) + \\
+ \vec{e}_\theta \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\alpha \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \alpha}\right) + \vec{e}_\alpha \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \alpha}\left(\vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\alpha \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \alpha}\right) = \\
= \vec{e}_r\vec{e}_r \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \vec{e}_r\vec{e}_\theta \frac{\partial}{\partial r}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_r\vec{e}_\alpha \frac{\partial}{\partial r}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \alpha} + \vec{e}_\theta\vec{e}_r\left(\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial \theta\, \partial r} - \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial \theta}\right) + \\
+ \vec{e}_\theta\vec{e}_\theta\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \theta^2}\right) + \vec{e}_\theta\vec{e}_\alpha\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \alpha}\right) + \vec{e}_\alpha\vec{e}_r\left(\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \alpha}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \alpha}\right) + \\
+ \vec{e}_\alpha\vec{e}_\theta\left(\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \alpha}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\cos\theta}{r\sin\theta}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \alpha}\right) + \vec{e}_\alpha\vec{e}_\alpha\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2}\right)
\end{gathered}$$

Выпишем матрицу $\nabla\nabla$:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial^2}{\partial r^2} & \frac{\partial}{\partial r}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} & \frac{\partial}{\partial r}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\alpha} \\ \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial\theta\,\partial r} - \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta} & \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} & \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\alpha} \\ \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\alpha}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\alpha} & \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\alpha}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\theta}{r\sin\theta}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\alpha} & \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2} \end{pmatrix}$$

Она симметрична. Интересно, что данный результат нельзя получить, если рассматривать покомпонентные коммутационные соотношения.

15 Гипергеометрическая функция

Сумма бесконечной геометрической прогрессии:

$$S = b_0(1 + x + x^2 + \ldots)$$

Её обобщением является следующая трёхпараметрическая функция:

$$F(\alpha,\beta;\gamma;x) = 1 + \frac{\alpha\beta}{\gamma}\frac{x}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)\beta(\beta+1)}{\gamma(\gamma+1)}\frac{x^2}{2!} + \frac{\alpha(\alpha+1)(\alpha+2)\beta(\beta+1)(\beta+2)}{\gamma(\gamma+1)(\gamma+2)}\frac{x^3}{3!} + \ldots$$

Некоторые очевидные соотношения:

$$F'(\alpha,\beta;\gamma;x) = \frac{\partial F(\alpha,\beta;\gamma;x)}{\partial x} = \frac{\alpha\beta}{\gamma}F(\alpha+1,\beta+1;\gamma+1;x)$$

16 Частица в скалярном поле Юкавы

Скалярное поле Юкавы:

$$U = U_0\frac{e^{-\gamma r}}{r}$$

Стационарное уравнение Шрёдингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{\hat{L}^2\psi}{2Mr^2} + U_0\frac{e^{-\gamma r}}{r}\psi = E\psi$$

Представляем ψ в виде:

$$\psi = R(r)Y_{lm}(\theta,\alpha)$$

Получаем:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{dR}{dr} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2}R + U_0\frac{e^{-\gamma r}}{r}R = ER$$

17 Решение линейных уравнений второго порядка при известном частном решении

Пусть дано уравнение:

$$y'' + f(x)y' + g(x)y = 0$$

и $\varphi(x)$ – его частное решение. Будем искать его второе решение в виде: $\psi\varphi$. При этом начальные условия перейдут в

$$y(x_0) = \psi(x_0)\varphi(x_0) = y_0$$

$$y'(x_0) = \psi'(x_0)\varphi(x_0) + \psi(x_0)\varphi'(x_0) = y'_0$$

$$\psi(x_0) = \frac{y_0}{\varphi(x_0)}$$

$$\psi'(x_0)\varphi^2(x_0) = \varphi(x_0)y'_0 - y_0\varphi'(x_0)$$

Тогда

$$\psi''\varphi + 2\psi'\varphi' + f\psi'\varphi = 0$$

$$\frac{\psi''}{\psi'} = -2\frac{\varphi'}{\varphi} - f$$

$$\psi' = \psi'(x_0)\frac{\varphi^2(x_0)}{\varphi^2(x)}\exp\left(-\int\limits_{x_0}^{x} f\,dx\right)$$

$$\psi = \psi'(x_0)\varphi^2(x_0)\int\limits_{x_0}^{x}\frac{1}{\varphi^2(x)}\exp\left(-\int\limits_{x_0}^{x} f\,dx\right)dx + \psi(x_0)$$

$$y = \frac{\varphi(x)}{\varphi(x_0)}\left[\varphi(x_0)(\varphi(x_0)y_0' - y_0\varphi'(x_0))\int\limits_{x_0}^{x}\frac{1}{\varphi^2(x)}\exp\left(-\int\limits_{x_0}^{x} f\,dx\right)dx + y_0\right]$$

Определитель Вронского:

$$\begin{vmatrix}\varphi & \varphi\psi \\ \varphi' & \varphi'\psi + \psi'\varphi\end{vmatrix} = \psi'\varphi^2 = \psi'(x_0)\varphi^2(x_0)\exp\left(-\int\limits_{x_0}^{x} f\,dx\right) \neq 0,\ \text{если } \psi'(x_0)\varphi^2(x_0) \neq 0$$

То есть решения, полученные таким методом, линейно независимы, если $\psi'(x_0) \neq 0$ и $\varphi(x_0) \neq 0$