

## Глава 3. ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

### 3.1. Операторы. Собственные функции и собственные значения.

#### 3.1.1. Операторы в квантовой механике.

Операторный метод – традиционная и основная формулировка квантовой механики. *В квантовой механике любой динамической переменной, любой физической величине приводится в соответствие оператор.* В этом параграфе кратко рассмотрим основные свойства операторного метода.

Оператор  $\hat{F}$  – это правило, по которому любой выбранной функции  $\varphi$  приводится в соответствие другая функция  $f$ :

$$f = \hat{F}\varphi \quad (3.1.1)$$

Ранее мы уже встречались с операторами: оператор градиента  $\nabla \equiv grad$ , оператор Лапласа  $\Delta = \nabla^2$ , операторы дивергенции и ротора  $div \equiv (\nabla \dots)$ ,  $rot \equiv [\nabla \dots]$ , соответственно.

При использовании операторов имеется «договорное» условие: оператор пишется всегда слева от функции, на которую он действует. Вообще оператор действует на все, что стоит справа от него, если нет ограничивающих скобок.

В квантовой механике применяются только *линейные операторы*, чтобы не нарушался принцип суперпозиции состояний. Одно из основных свойств линейного оператора: его действие на сумму функций равно сумме действий оператора на каждую из них в отдельности, которое записывается в виде:

$$\hat{F}(C_1\varphi_1 + C_2\varphi_2) = C_1\hat{F}\varphi_1 + C_2\hat{F}\varphi_2, \quad (3.1.2)$$

где  $C_1, C_2$  – произвольные постоянные.

Примеры операторов, соответствующих физическим величинам:

1) *Оператор координаты*: является оператором умножения

$$\hat{x} = x. \quad (3.1.3)$$

2) *Оператор полной энергии* – Гамильтониан:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r}). \quad (3.1.4)$$

Оператор кинетической энергии:

$$\hat{E}_{kin} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2. \quad (3.1.5)$$

Оператор потенциальной энергии (обычно оператор умножения):

$$\hat{U} = U(\vec{r}) \quad (3.1.6)$$

3) *Оператор импульса*. Исходя из выражения для кинетической энергии  $E_{kin} = p^2/2m$ , получим, что оператор импульса равен:

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla \quad (3.1.7)$$

Оператор  $x$ - проекции импульса (на выбранную ось  $0x$ ) имеет вид:

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (3.1.8)$$

Аналогично выглядят операторы проекции импульса и на другие оси. Вводятся и другие операторы: момента импульса, проекции момента импульса, спина и так далее.

### 3.1.2. Собственные функции и собственные значения.

Итак, каждой физической величине сопоставляется оператор. Свойства операторов  $\hat{F}$  и  $\hat{G}$  определяются уравнениями на *собственные функции и собственные значения*:

$$\begin{aligned} \hat{F}\varphi_n &= f_n\varphi_n \\ \hat{G}\psi_n &= g_n\psi_n \end{aligned} \quad (3.1.9)$$

где  $n$  – немой значок, соответствующий номеру решения. Из этих уравнений находятся функции  $\varphi_n$  или  $\psi_n$  и числа  $f_n$  или  $g_n$ , соответствующих операторам  $\hat{F}$  или  $\hat{G}$ .

На примере второго уравнения в (3.1.9) с оператором  $\hat{G}$  рассмотрим основные определения. Так, найденные волновые функции  $\psi_n$  (их число может быть конечным, а может быть бесконечным) – называются *собственными функциями оператора  $\hat{G}$* . Иначе говоря, собственные функции – это такие функции, которые под действием оператора  $\hat{G}$  переходят сами в себя, будучи умноженными на постоянное число  $g_n$ . Соответствующие значения  $g_n$  – *собственные значения оператора  $\hat{G}$* .

Физический смысл введенных функций: **собственные волновые функции  $\psi_n$  описывают в квантовой механике такие состояния, в которых данная физическая величина  $g$  имеет определенное значение  $g_n$ .**

Или иначе, если частица (или система) находится в состоянии  $\psi_n$ , то описывающая ее физическая величина  $g$  в этом состоянии равна  $g_n$  и остается постоянной во времени.

Совокупность собственных значений  $g_n$  оператора  $\hat{G}$  называют *спектром оператора  $\hat{G}$* .

Спектр собственных значений может быть *дискретным* и *непрерывным*. Дискретный спектр  $g_n$  имеет место, если уравнение  $\hat{G}\psi_n = g_n\psi_n$  имеет решение не при всех, а только при определенных значениях  $g_n$ . Непрерывный или сплошной спектр  $g_n$  имеет место, когда это уравнение имеет решение при всех значениях  $g_n$  или хотя бы при всех  $g_n$  в некоторой области непрерывных значений. Спектр собственных значений может быть смешанным, т.е. состоящим из дискретных и непрерывных значений  $g_n$ .

Рассмотрим несколько примеров:

- 1). Уравнение на собственные значения оператора координаты  $\hat{x} = x$  имеет вид

$$\hat{x}\psi = x\psi \quad (3.1.10)$$

Это уравнение имеет решение при всех (любых) значениях координаты, таким образом оператор координаты  $x$  имеет сплошной спектр.

- 2). Уравнение на собственные значения оператора проекции импульса  $\hat{p}_x = -i\hbar\partial/\partial x$

$$\begin{aligned} \hat{p}_x\Psi &= p_x\Psi \\ -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Psi &= p_x\Psi \end{aligned} \quad (3.1.11)$$

Решая (3.1.11), получаем собственные функции оператора проекции импульса

$$\Psi_{p_x} = A e^{\frac{i}{\hbar}p_x x} \quad (3.1.12)$$

В результате получаем решение уравнения (3.1.11) в виде (3.1.12) при любых значениях  $p_x$ , и отсюда заключаем, что оператор проекции импульса  $\hat{p}_x$  имеет непрерывный спектр.

- 3). Стационарное уравнение Шредингера – уравнение на собственные значения оператора Гамильтона, т.е. оператора полной энергии (3.1.4):

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n \quad (3.1.13)$$

Решение этого уравнения во многом зависит от вида оператора потенциальной энергии  $U(\vec{r})$ , входящего в (3.1.4). При этом в результате решения можем получить дискретный спектр энергий в случае, когда решение имеется только при определенных значениях энергии  $E_n$  (например, как связанные состояния в атоме водорода), либо непрерывный спектр, когда решение уравнения получаем при любой энергии (например, энергетические состояния свободной частицы).

### 3.1.3. Правила действия с операторами.

Рассмотрим кратко основные свойства операторов в квантовой механике.

1). Суперпозиция действия двух или нескольких операторов

$$\hat{G}(C_1\varphi + C_2\psi) = C_1\hat{G}\varphi + C_2\hat{G}\psi \quad (3.1.14)$$

2). Действие оператора, определяемого суммой операторов, равно сумме действий каждого оператора на волновую функцию

$$(\hat{G} + \hat{F})\psi = \hat{G}\psi + \hat{F}\psi \quad (3.1.15)$$

3). Действие оператора, определяемого произведением операторов, равно последовательному упорядоченному действию операторов

$$(\hat{G}\hat{F})\psi = \hat{G}(\hat{F}\psi) \quad (3.1.16)$$

В общем случае операторы  $\hat{G}$  и  $\hat{F}$  некоммутативны, т.е. их последовательное действие в прямом порядке не совпадает с последовательным обратным действием операторов:  $\hat{G}\hat{F}\psi \neq \hat{F}\hat{G}\psi$ . Можно определить *коммутатор двух операторов* или *скобки Пуассона*:

$$[\hat{G}, \hat{F}] = \hat{G}\hat{F} - \hat{F}\hat{G} \quad (3.1.17)$$

Определение *коммутирующих операторов*: операторы называются коммутирующими (или коммутативными), когда действие их произведения на волновые функции не зависит от порядка последовательности операторов:

$$\hat{G}\hat{F} = \hat{F}\hat{G}, \quad (3.1.18)$$

Коммутатор таких операторов равен нулю  $[\hat{G}, \hat{F}] = 0$ .

Если последовательное действие двух операторов на стоящую справа функцию зависит от порядка их действия, то такие операторы называются *некоммутирующими операторами*  $[\hat{G}, \hat{F}] \neq 0$ .

Приведем примеры коммутативных и некоммутирующих операторов:

а). Коммутируют операторы координаты  $y$  и проекции импульса на перпендикулярную по отношению к  $y$  ось, например  $\hat{p}_x$ :

$$\hat{y}\hat{p}_x\psi = \hat{p}_x\hat{y}\psi,$$

$$[\hat{y}, \hat{p}_x] = 0.$$

В самом деле, действие этих операторов на волновую функцию не зависит от порядка их действия

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

б). Не коммутируют операторы координаты и проекции оператора импульса на эту же ось:

$$\hat{x}\hat{p}_x\psi - \hat{p}_x x\psi = [\hat{x}, \hat{p}_x]\psi \neq 0.$$

Их коммутатор равен:

$$x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi - \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)(x\psi) = -i\hbar x\psi'_x + i\hbar(x\psi)'_x = i\hbar\psi$$

Или в символической форме коммутатор можно представить в следующем виде:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \quad (3.1.19)$$

Важные свойства, касающиеся коммутирующих операторов, состоят в том, что у этих операторов могут быть общие собственные волновые функции и одновременно определенные собственные значения.

Выводы параграфа:

- 1). Физические величины, чьи операторы коммутируют, могут иметь одновременно определенные значения и могут быть одновременно измерены с любой точностью.
- 2). Физические величины, которым соответствуют некоммутирующие операторы, не могут иметь одновременно определенные значения, и, соответственно, не могут быть одновременно точно измерены.

---

**Примечание 1.** Существуют операторы, изменение порядка действия которых приводит к изменению знака  $\hat{F}\hat{G} = -\hat{G}\hat{F}$ . Такие операторы называются антикоммутирующими операторами. Или иначе, их антикоммутатор равен нулю:

$$\hat{F}\hat{G} + \hat{G}\hat{F} = \{\hat{F}, \hat{G}\} = 0 \quad (3.1.20)$$


---

## 3.2. Самосопряженные или эрмитовы операторы.

### 3.2.1. Самосопряженные операторы.

Непосредственно измеряемые (“наблюдаемые”) физические величины вещественны. Отсюда следует, что все собственные значения оператора  $\hat{G}$ , соответствующего данной физической величине, —  $g_n$  должны быть вещественны.

Что мы получаем в результате измерения физической величины, описываемой оператором  $\hat{G}$ ?

А). Если физическая система (частица) находится в состоянии, описываемом **собственной функцией**  $\psi_n$  оператора  $\hat{G}$ , то при измерении получим собственное значение этого оператора  $g_n$ , которое следует из уравнения

$$\hat{G}\psi_n = g_n\psi_n.$$

Б). Если система (частица) описывается произвольной функцией  $\psi$ , то при измерении наблюдаемой величины, т.е. при действии оператора  $\hat{G}$ , получим линейную комбинацию из собственных значений  $g_n$  – некое среднее значение, которое тоже вещественно. Например: разлагая произвольную функцию  $\psi$  в ряд (интеграл) по собственным функциям оператора  $\hat{G}$  –  $\psi_n$  получаем

$$\psi = C_1\psi_1 + C_2\psi_2 + \dots$$

и тогда в результате действия оператора  $\hat{G}$  на эту функцию имеем:

$$\hat{G}\psi = C_1g_1\psi_1 + C_2g_2\psi_2 + \dots$$

Вводится понятие **сопряженного** оператора  $\hat{F}^+$  следующим равенством:

$$\int \psi_1^* \hat{F} \psi_2 dV = \int \psi_2 (\hat{F}^+ \psi_1)^* dV \quad (3.2.1)$$

То есть оператор  $\hat{F}^+$  является сопряженным к оператору  $\hat{F}$ , когда в интеграле (3.2.1) действие  $\hat{F}$  на правую функцию  $\psi_2$ , стоящую под интегралом, дает тот же результат, как и действие комплексно сопряженного оператора  $(\hat{F}^+)^*$  на левую функцию  $\psi_1^*$ .

**Самосопряженные операторы** определяются следующим равенством:

$$\int \psi_1^* \hat{F} \psi_2 dV = \int \psi_2 (\hat{F}^+ \psi_1)^* dV = \int \psi_2 (\hat{F} \psi_1)^* dV \quad (3.2.2)$$

где  $\hat{F}^+$  – **сопряженный** оператор к оператору  $\hat{F}$ . Итак, если выполняется равенство

$$\hat{F}^+ = \hat{F} \quad (3.2.3)$$

то этот оператор  $\hat{F}$  называется **эрмитовым** или **самосопряженным** оператором. Продолжая равенство (3.2.2), можно сказать, что действие самосопряженного оператора  $\hat{F}$  на правую от него функцию совпадает с действием комплексно сопряженного оператора на левую функцию:

$$\int \psi_1^* \hat{F} \psi_2 dV = \int \psi_2 (\hat{F} \psi_1)^* dV = \int \psi_2 \hat{F}^* \psi_1^* dV \quad (3.2.4)$$

Как покажем в следующем пункте этого параграфа, именно эрмитовые операторы имеют вещественные собственные значения.

Часто вводится понятие *транспонированного* оператора  $\hat{F}^{mp}$ , которое определяется из соотношения

$$\int \psi_1^* \hat{F} \psi_2 dV = \int (\hat{F}^{mp} \psi_1^*) \psi_2 dV, \quad (3.2.5)$$

то есть вводится оператор  $\hat{F}^{mp}$ , который дает тот же результат, действуя на левую функцию, как и оператор  $\hat{F}$ , действующий на правую. Таким образом, сопряженный оператор – это комплексно сопряженный оператор от транспонированного оператора:

$$\hat{F}^+ = (\hat{F}^{mp})^* \quad (3.2.6)$$

### Рассмотрим примеры операторов.

- 1) Легко убедиться из (3.2.4), что оператор координаты  $\hat{x} = x$  эрмитов (самосопряженный) оператор.
- 2) Рассмотрим оператор дифференцирования  $\hat{F} = d/dx$ . При этом будем считать, что волновые функции обращаются в 0 на бесконечности, т.е.  $\psi_1, \psi_2 \rightarrow 0$  при  $x \rightarrow \pm\infty$ . Вычислим оператор, сопряженный оператору  $\hat{F}$  с помощью интегрирования по частям:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \frac{d}{dx} \psi_2 dx = \psi_1^* \psi_2 \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \frac{d}{dx} \psi_1^* dx = 0 + \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \left( -\frac{d}{dx} \right) \psi_1^* dx$$

Таким образом, оператор, сопряженный оператору  $\hat{F} = d/dx$ , равен:

$$\hat{F}^+ = -\frac{d}{dx} \quad (3.2.7)$$

и, следовательно, оператор  $\hat{F} = d/dx$  не является эрмитовым.

- 3) Оператор проекции импульса  $\hat{F} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} = \hat{p}_x$  является самосопряженным оператором. Проверим это:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi_2 dx &= \psi_1^* (-i\hbar) \psi_2 \Big|_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_1^* \right) dx = \\ &= 0 + \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi_1^* dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_1 \right)^* dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 (\hat{p}_x \psi_1)^* dx \end{aligned}$$

Таким образом, оператор проекции импульса

$$\hat{p}_x = \hat{p}_x^+ = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (3.2.8)$$

эрмитов (самосопряженный) оператор.

### 3.2.2. Собственные функции и собственные значения самосопряженных операторов.

Рассмотрим основные свойства эрмитовых операторов.

1). **Собственные значения эрмитовых операторов – вещественны.** Запишем уравнение на собственные значения и комплексно сопряженное ему уравнение:

$$\hat{F}\psi_n = \lambda_n \psi_n \quad \text{и} \quad \hat{F}^* \psi_n^* = \lambda_n^* \psi_n^* \quad (3.2.9)$$

Умножим слева первое уравнение на  $\psi_n^*$  (либо второе на  $\psi_n$ ), проинтегрируем по всему пространству и воспользуемся свойством «эрмитовости»:

$$\int \psi_n^* \hat{F} \psi_n dV = \lambda_n \int |\psi_n|^2 dV = \lambda_n = \int \psi_n (\hat{F} \psi_n)^* dV = \lambda_n^*$$

Отсюда имеем равенство

$$\lambda_n = \lambda_n^* , \quad (3.2.10)$$

из которого следует, что **собственные значения эрмитовых операторов вещественны.**

2). Произведение двух **эрмитовых коммутирующих** операторов есть эрмитов оператор

$$\hat{F}\hat{G} = \hat{F}^+ \hat{G}^+ = (\hat{G}\hat{F})^+ = (\hat{F}\hat{G})^+ \quad (3.2.11)$$

3). Важное свойство эрмитовых операторов. Пусть имеем дискретный набор собственных значений и собственных функций оператора  $\hat{F}$  (причем сначала считаем, что нет вырождения, т.е. все волновые функции  $\psi_n$  разные для разных собственных значений  $\lambda_n$ ):

$$\begin{aligned} \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots \\ \psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots \end{aligned} \quad (3.2.12)$$

Такой набор волновых функций образует, так называемую, **полную систему ортонормированных** волновых функций:

$$\int \psi_m^* \psi_n dV = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ 1, & m = n \end{cases} = \delta_{mn} \quad (3.2.13)$$

где  $\delta_{mn}$  – символ Кронекера. В самом деле, для доказательства ортогональности рассмотрим два равенства

$$\begin{cases} \hat{F}\psi_n = \lambda_n \psi_n \\ \hat{F}^* \psi_m^* = \lambda_m^* \psi_m^* \end{cases} \quad (3.2.14)$$

Умножим слева первое уравнение на  $\psi_m^*$ , а второе – на  $\psi_n$ , и проинтегрируем по всему пространству. Вычитая второе уравнение (3.2.14) из первого



уравнения и учитывая, что  $\hat{F}$  эрмитов оператор и, следовательно,  $\lambda_m^* = \lambda_m$ , получаем:

$$\begin{aligned} 0 &= \int (\lambda_n - \lambda_m) \psi_m^* \psi_n dV \\ (\lambda_n - \lambda_m) \int \psi_m^* \psi_n dV &= 0 \end{aligned} \quad (3.2.15)$$

Из (3.2.15) следует, что, если собственные значения различны  $\lambda_n \neq \lambda_m$ , получаем ортогональность функций  $\int \psi_m^* \psi_n dV = 0$ . Полнота набора собственных функций означает, что любую функцию можно разложить в ряд по функциям  $\psi_n$ .

В случае, когда имеем вырождение состояния, тогда введем новые волновые функции состояния и возьмем их в виде линейной комбинации:

$$\Psi_n = \alpha_{n_1} \psi_{n_1} + \alpha_{n_2} \psi_{n_2} + \alpha_{n_3} \psi_{n_3} + \dots, \quad (3.2.16)$$

где все волновые функции имеют одно и то же собственное значение  $\hat{F}\psi_{n_i} = \lambda_n \psi_{n_i}$ . При этом линейные комбинации можно сделать такими, что новые волновые функции  $\psi_n$  были бы ортонормированными.

**Вывод:** *условие ортонормированности собственных функций самосопряженных линейных операторов выполняется всегда.* В случае вырождения можно заменить собственные функции их ортонормированными линейными комбинациями.

4). **Разложение произвольной функции в ряд по системе собственных функций  $\psi_n$  самосопряженных линейных операторов.** Иначе говоря, любую функцию можно представить в виде:

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_n C_n \psi_n(\vec{r}) \quad (3.2.17)$$

Коэффициенты разложения можно получить, умножив (3.2.17) на  $\psi_k^*$  и проинтегрировав по объему:

$$\int \Psi(\vec{r}) \psi_k^*(\vec{r}) dV = \int \sum_n C_n \psi_n(\vec{r}) \psi_k^*(\vec{r}) dV = \sum_n C_n \int \psi_k^*(\vec{r}) \psi_n(\vec{r}) dV = \sum_n C_n \delta_{kn} = C_k$$

Таким образом, имеем выражение для получения коэффициентов разложения:

$$C_k = \int \Psi(\vec{r}) \psi_k^*(\vec{r}) dV \quad (3.2.18)$$

Каков смысл этих коэффициентов? *Квадрат коэффициента разложения  $C_k^2$  дает вероятность того, что в состоянии, описываемом волновой функцией  $\Psi(\vec{r})$ , присутствует примесь состояния  $\psi_k$ .*

Если имеем непрерывный спектр значений  $\lambda$ , тогда волновую функцию раскладываем в интеграл:

$$\Psi(\vec{r}) = \int C(\lambda) \psi_{\lambda}(\vec{r}) d\lambda, \quad (3.2.19)$$

где коэффициенты определяются также интегралом

$$C(\lambda_1) = \int \psi_{\lambda_1}^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) dV \quad (3.2.20)$$

Волновые функции непрерывного спектра (вместо (3.2.13)) нормируются на  $\delta$ - функцию:

$$\int \psi_{\lambda'}^*(\vec{r}) \psi_{\lambda}(\vec{r}) dV = \delta(\lambda' - \lambda) \quad (3.2.21)$$

Рассмотрим некоторые свойства  $\delta$ - функции. Функция  $\delta(x-a)$  везде равна нулю за исключением точки  $x = a$ , где она обращается в бесконечность:

$$\delta(x-a) = \begin{cases} 0, & x \neq a \\ \infty, & x = a \end{cases}$$

или

$$\delta(x) = \begin{cases} 0, & x \neq 0 \\ \infty, & x = 0 \end{cases} \quad (3.2.22)$$

Однако интеграл от  $\delta$ - функции равен единице (т.е. имеем бесконечность с "мощностью" равной 1):

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-a) dx = 1$$

или

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1 \quad (3.2.23)$$

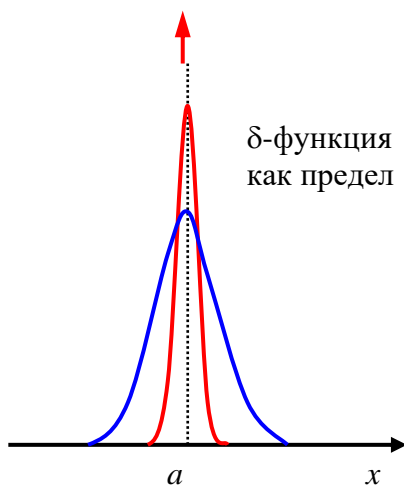


Рис. 2.1.

$\delta$ -функция  
как предел

Вообще геометрически  $\delta$  - функцию можно рассматривать как предел максимума, стремящегося к бесконечности в точке  $a$  и сохраняющего равную единице площадь под кривой (см рис. 2.1). Важное свойство  $\delta$ - функции состоит в том, что она "вырезает" в подынтегральной функции значение этой функции в точке  $a$ :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x) \delta(x-a) dx = \Psi(a) \quad (3.2.24)$$

Последнее условие и нормировка позволяет получать коэффициенты  $C(\lambda)$  из разложения (3.2.19).

5). **Вычисление средних значений физических величин.** Поскольку вероятность  $dW$  найти частицу в элементе объема  $dV$  равна

$$dW = \psi^*(\vec{r})\psi(\vec{r})dV = |\psi(\vec{r})|^2 dV,$$

то можно определить средние значения различных физических величин в состоянии, определяемой  $\psi(\vec{r})$ . Напомним, что среднее значение, например, координаты, определяется:

$$\langle x \rangle = \int x dW = \int \rho(x) x dx$$

где вероятность  $dW$  определяется через плотность вероятности  $dW = \rho(x) dx$ . Аналогично получаем для средних значений координаты в состоянии, определяемой волновой функцией  $\Psi(x)$ :

$$\langle x \rangle = \frac{\int \Psi^*(x) x \Psi(x) dx}{\int \Psi^*(x) \Psi(x) dx} \quad (3.2.25)$$

Если волновая функция  $\Psi(x)$  уже нормирована, то среднее значение координаты равно:

$$\langle x \rangle = \int \Psi^*(x) x \Psi(x) dx \quad (3.2.26)$$

Можно записать выражение для **среднего значения любого оператора  $\hat{F}$**  в состоянии, описываемом произвольной волновой функцией  $\Psi(x)$ :

$$\langle \hat{F} \rangle = \int \Psi^*(\vec{r}) \hat{F} \Psi(\vec{r}) dV \quad (3.2.27)$$

Следуя (3.2.17), волновую функцию  $\Psi(x)$  можно разложить в ряд (интеграл) по собственным функциям оператора  $\hat{F}$ :

$$\hat{F} \psi_n = \lambda_n \psi_n.$$

Тогда получаем из (3.2.27):

$$\begin{aligned} \langle \hat{F} \rangle &= \int \sum_n C_n^* \psi_n^* \cdot \hat{F} \cdot \sum_m C_m \psi_m dV = \sum_{n,m} C_n^* C_m \int \psi_n^* \hat{F} \psi_m dV = \\ &= \sum_{n,m} C_n^* C_m \lambda_m \int \psi_n^* \psi_m dV = \sum_{n,m} \lambda_m C_n^* C_m \delta_{nm} = \sum_n \lambda_n |C_n|^2 \end{aligned} \quad (3.2.28)$$

Таким образом, среднее значение оператора  $\hat{F}$  определяется суммой собственных значений этого оператора, взятых с весовыми множителями  $|C_n|^2$ , определяющими долю (вероятность) примеси данного собственного состояния  $n$  в полной волновой функции  $\Psi(x)$ .

Аналогичные выражения при вычислении среднего значения оператора  $\hat{F}$  можно получить для непрерывного спектра собственных значений  $\lambda$ , используя выражения (3.2.19) – (3.2.24).

### 3.3. Частица в потенциальной яме

#### 3.3.1. Одномерная потенциальная яма с бесконечно высокими стенками

Пусть частица совершает одномерное движение вдоль оси  $x$  в потенциальной яме, изображенной на рис. 3.1. Математически одномерный потенциал записывается в виде:

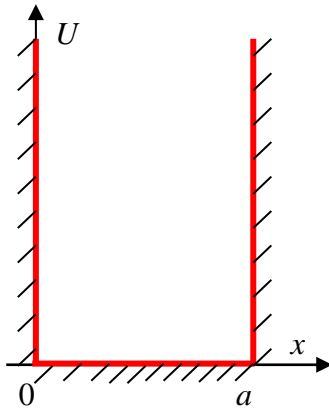


Рис. 3.1.

$$U = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq a \\ \infty & x > a, x < 0 \end{cases} \quad (3.3.1)$$

Стационарное уравнение Шредингера имеет вид:

$$\hat{H}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U\Psi = E\Psi \quad (3.3.2)$$

Запишем это уравнение в области внутри ямы, где потенциальная энергия равна нулю:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) = E\Psi(x) \quad (3.3.3)$$

Преобразуем уравнение к виду:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + k^2\Psi = 0 \quad \text{или} \quad \Psi'' + k^2\Psi = 0, \quad (3.3.4)$$

где ввели волновое число  $k$  обычным соотношением:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (3.3.5)$$

Решения вне ямы не существует, поскольку там потенциальная энергия равна бесконечности, и частица не может находиться вне ямы. Для учета этого обстоятельства введем граничные условия, запрещающие частице находиться на левой и правой границах (стенках) потенциальной ямы:

$$\Psi(0) = \Psi(a) = 0 \quad (3.3.6)$$

Общее решение уравнения (3.3.4) представляем в виде:

$$\Psi = A \sin kx + B \cos kx \quad (3.3.7)$$

Для определения коэффициентов в решении (3.3.7) используем граничные условия:

- 1) при  $x = 0$  имеем  $\Psi(0) = B = 0$ , откуда получаем коэффициент  $B = 0$ .
- 2) при  $x = a$  имеем  $\Psi(a) = A \sin ka = 0$ , откуда получаем, что  $\sin ka = 0$ , и  $ka = \pm n\pi$ , где  $n = 1, 2, 3, \dots$  (коэффициент  $A \neq 0$ , иначе внутри вообще нет частицы).

Фактически полученное равенство из граничных условий

$$ka = \pm n\pi \quad (3.3.8)$$

есть *условие квантования уровней энергии* в потенциальной яме с бесконечными стенками, поскольку решения отличные от нуля имеются только при определенном наборе волновых чисел.

Итак, получаем окончательно решение уравнения (3.3.4):

$$\Psi_n = A \sin \frac{n\pi}{a} x \quad (3.3.9)$$

Эти функции являются *собственными функциями гамильтониана* (3.3.2) при данных граничных условиях (3.3.6).

**Примечание 1.** Вместо решения (3.3.7) можно было записать общее решение в виде суммы экспонент:

$$\Psi = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$$

Используя те же граничные условия (3.3.6), получаем то же условие квантования (3.3.8) и решение (3.3.9).

**Примечание 2.** Об импульсе. Внутри ямы гамильтониан равен  $\hat{H} = \hat{p}^2/2m$  и казалось бы коммутатор оператора импульса с гамильтонианом равен нулю  $[\hat{p}, \hat{H}] = [\hat{p}, \hat{p}^2/2m] = 0$ . При этом получаем, что энергия  $E$  и импульс  $p$  для электрона в бесконечной потенциальной яме одновременно измеримы. Однако, это не так. Собственная волновая функция импульса  $\psi_p = C \exp(ipx/\hbar)$  не удовлетворяет поставленным граничным условиям. Импульс только по модулю имеет постоянное значение, но сам импульс  $p$  как векторная величина не имеет определенного значения.

Подставляя условие квантования в уравнение (3.3.5), получаем уровни энергии:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 \quad (3.3.10)$$

Итак, *энергия частицы в потенциальной яме принимает дискретные значения* ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ). Состояния частицы описываются соответствующими волновыми функциями (3.3.9). При этом постоянную  $A$  находим из условия нормировки:

$$\int_0^a |\Psi(x)|^2 dx = A^2 \int_0^a \sin^2 \left( \frac{n\pi}{a} x \right) dx = \frac{1}{2} A^2 \int_0^a \left( 1 - \cos \frac{2n\pi}{a} x \right) dx = A^2 \frac{a}{2} = 1$$

Отсюда получаем коэффициент  $A$ :

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad (3.3.11)$$

Окончательно запишем собственные функции и собственные энергии:

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \quad (3.3.12)$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2$$

Здесь квантовое число  $n = 1, 2, 3, \dots$  определяет номер состояния. На рисунке 3.2 построены графики энергии, волновых функций  $\Psi_n$  (рис. 3.2 А) и плотности вероятности  $|\Psi_n|^2$  (рис. 3.2 Б) нахождения частицы внутри ямы для различных значений  $n$ :

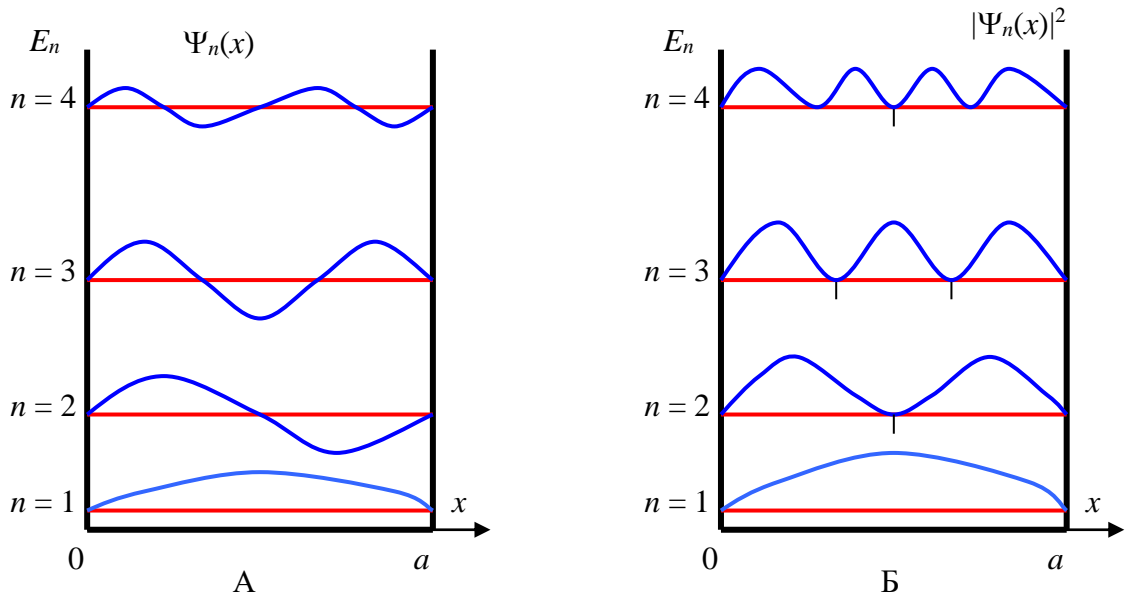


Рис. 3.2.

При  $n = 1$  мы имеем низшее значение энергии частицы

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (3.3.13)$$

Наименьшее значение энергии можно оценить так же из соотношения неопределенностей:  $\Delta p \cdot \Delta x \geq \hbar$ . Здесь  $\Delta x = a$ ,  $\Delta p \sim p = \sqrt{2mE}$ , тогда получаем:

$$a \cdot \sqrt{2mE} \geq \hbar$$

и отсюда имеем

$$E \geq \frac{\hbar^2}{2ma^2} \quad (3.3.14)$$

**Примечание 3.** В этой простой задаче те же значения энергии можно так же получить исходя из правил квантования Бора-Зоммерфельда (или что то же самое, из стоячих волн де Бройля):  $\oint p_x dx = n2\pi\hbar$ . Вычисляя интеграл от 0 до  $a$  и обратно, имеем:

$$2a \cdot \sqrt{2mE} = n2\pi\hbar \quad (3.3.15)$$

и отсюда получаем то же выражение для энергии (3.3.12).

Расстояние между соседними уровнями определяется разностью:

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (2n+1) \quad (3.3.16)$$

При больших значениях номера уровня  $n$  ( $n \gg 1$ ), для разности получаем:

$$\Delta E_n \approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{ma^2} n \quad (3.3.17)$$

Оценим расстояние между уровнями энергий для нескольких случаев.

- 1). Атомы или молекулы находятся в сосуде с размерами  $a \sim 1$  см. Масса молекулы  $m \sim 10^{-23}$  г. Энергии квантованы, но оценим расстояние между уровнями энергии по (3.3.17):

$$\Delta E_n \sim \frac{(3.14)^2 \cdot (1.05)^2 10^{-54}}{1 \cdot 10^{-23}} n \sim 10^{-30} n \text{ (эрг)} \quad (3.3.18)$$

Получаем, что расстояние между уровнями чрезвычайно мало, уровни расположены очень густо. Для наших приборов они представляют практически сплошной спектр. Дискретность уровней никак не сказывается на движении молекул в таком сосуде.

- 2). Примерно те же условия имеем для электронов в металле. Свободные или валентные электроны находятся в “потенциальной яме”, размеры которой пусть также порядка  $a \sim 1$  см. Тогда расстояние между уровнями (при массе электронов  $m \sim 10^{-27}$  г) равно:

$$\Delta E_n \sim 10^{-26} n \text{ (эрг)} \approx 10^{-14} n \text{ (эВ)} \quad (3.3.19)$$



Рис. 3.3.

Расстояние между уровнями также чрезвычайно мало, и дискретность уровней не сказывается на движении электронов в металле.

- 3). Иное дело для электронов, находящихся в яме с размерами порядка размеров атома  $a \sim 10^{-8}$  см. В этом случае расстояние между уровнями весьма существенно:

$$\Delta E_n \sim 10^{-10} n \text{ (эрг)} \approx 10^2 n \text{ (эВ)} \quad (3.3.20)$$

Поэтому в объектах с подобными размерами необходимо учитывать дискретность энергетических уровней.

**Дополнение 1.** Рассмотрим 3-х мерную прямоугольную яму с бесконечными стенками. Пусть размеры ямы равны:  $a, b, c$ . Внутри ямы потенциальная энергия равна нулю:  $U = 0$  при  $0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq b, 0 \leq z \leq c$ . На границах  $U = \infty$ . Движение частицы в яме происходит

независимо вдоль осей  $x$ ,  $y$  и  $z$ . Тогда волновая функция может быть представлена в виде произведения функций, отдельно зависящих от каждой из координат, и полная функция имеет вид:

$$\Psi_{n_1 n_2 n_3} = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin \frac{n_1 \pi}{a} x \cdot \sin \frac{n_2 \pi}{b} y \cdot \sin \frac{n_3 \pi}{c} z \quad (3.3.21)$$

При этом энергия равна сумме энергий движений по всем трем осям:

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left( \frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right) \quad \text{при } n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \dots \quad (3.3.22)$$

Когда размеры ямы:  $a$ ,  $b$ ,  $c$  соизмеримы, либо  $a = b$  ( $b = c$ ), либо  $a = b = c$  возникают вырожденные уровни энергии. Это когда одному и тому же значению энергии соответствуют несколько состояний, описываемых различными функциями.

---

### 3.3.2. Одномерная потенциальная яма с конечными стенками

Рассмотрим одномерную прямоугольную яму со стенками конечной высоты (см рис. 3.4). Определим возможные значения энергии и волновые функции частицы в такой яме. Расположим начало координат на дне ямы симметрично относительно стенок:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \\ U_0, & x > \frac{a}{2}; x < -\frac{a}{2} \end{cases} \quad (3.3.23)$$

Имеем симметричную яму  $U(x) = U(-x)$  относительно начала координат, и при решении задачи этим воспользуемся ниже.

Решения уравнения Шредингера рассмотрим в 2-х областях отдельно: внутри и вне ямы. Для этих областей мы получаем различные решения. Для получения общего решения необходимо “сшивать” эти решения на границе ямы для выполнения условия непрерывности волновой функции и ее производных. Для этого необходимо приравнять значения волновой функции и их производных на границах.

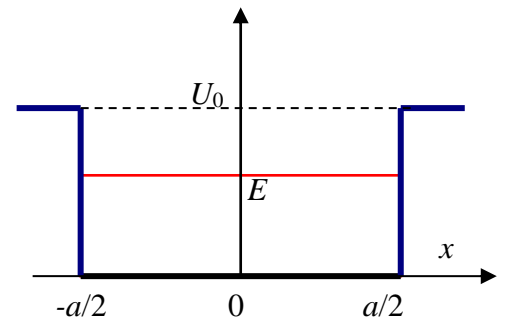


Рис. 3.4.

3.3.2.1. Энергия частицы больше глубины ямы. Пусть энергия отсчитывается от дна ямы. При энергии частицы  $E > U_0$  имеем **непрерывный спектр энергий**, – частица пролетает над ямой и может иметь любую энергию. В самом деле, в области координат внутри самой ямы имеем уравнение типа (3.3.4):

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0 \quad (3.3.24)$$



Вводя волновое число, как и ранее в (3.3.5)  $k'_0 = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ , записываем решение в этой области:

$$\psi(x) = A_1 \cos k'_0 x + B_1 \sin k'_0 x \quad (3.3.25)$$

В областях вне ямы имеем уравнение:

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)\psi = 0 \quad (3.3.26)$$

Вводя новое волновое число  $k_0 = \sqrt{2m(E - U_0)/\hbar^2}$ , получаем вне ямы решение аналогичное (3.3.25), но с другими параметрами:

$$\psi(x) = A \cos k_0 x + B \sin k_0 x \quad (3.3.27)$$

Далее сшиваем полученные решения (3.3.25) и (3.3.27) на границах ямы  $x = \pm a/2$ , то есть при этих координатах приравниваем сами функции и их производные. В силу симметрии относительно начала координат достаточно рассмотреть эти соотношения только при одной границе, например при  $x = a/2$ .

$$\begin{aligned} A_1 \cos \frac{k'_0 a}{2} + B_1 \sin \frac{k'_0 a}{2} &= A \cos \frac{k_0 a}{2} + B \sin \frac{k_0 a}{2} \\ -A_1 k'_0 \sin \frac{k'_0 a}{2} + B_1 k'_0 \cos \frac{k'_0 a}{2} &= -A k_0 \sin \frac{k_0 a}{2} + B k_0 \cos \frac{k_0 a}{2} \end{aligned}$$

Из полученных уравнений определяются коэффициенты при осциллирующих функциях, и можно легко убедиться, что система уравнений имеет решения при любых  $k'_0$ . Это означает, что любые энергии частицы разрешены. Таким образом, при  $E > U_0$  имеем сплошной спектр энергий.

**3.3.2.2. Энергия частицы меньше высоты ямы  $E < U_0$ .** В этом случае мы получаем **дискретный спектр энергий**, т.е. получаем связанные состояния, когда волновая функция при удалении ее от ямы стремится к нулю  $\psi \rightarrow 0$ . Для двух областей имеем следующие уравнения и их решения:

$$\begin{aligned} 1). \quad |x| < a/2 \quad \psi'' + k^2 \psi = 0, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \\ \psi_< = A \sin kx + B \cos kx \end{aligned} \quad (3.3.28)$$

$$\begin{aligned} 2). \quad |x| > a/2 \quad \psi'' - \alpha^2 \psi = 0, \quad \alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E) = \kappa^2 - k^2, \quad \kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} U_0 \\ \psi_> = C_1 e^{-\alpha x} + C_2 e^{\alpha x} \end{aligned} \quad (3.3.29)$$

Здесь удобно ввести понятие **четности состояний**. Поскольку потенциальная яма симметрична относительно начала координат, то волновая функция также обладает свойствами симметрии. Введем оператор четности  $\hat{P}$ , определяемый с помощью соотношения:

$$\hat{P}\psi(x) = \lambda\psi(-x). \quad (3.3.30)$$

Собственные числа оператора четности могут быть получены, если повторно подействовать оператором четности  $\hat{P}$  на уравнение (3.3.30). При этом получаем исходную волновую функцию:

$$\hat{P}\hat{P}\psi(x) = \lambda^2\psi(x) = \psi(x)$$

Из последнего равенства получаем значения собственных чисел  $\lambda = \pm 1$ . Когда  $\lambda = 1$ , то получаем “четное” состояние, если  $\lambda = -1$ , то имеем “нечетное” состояние. Легко видеть, что оператор четности коммутирует с гамильтонианом рассматриваемой задачи, поскольку  $U(x) = U(-x)$ :

$$[\hat{P}, \hat{H}] = 0. \quad (3.3.31)$$

Таким образом получаем, что четность и энергия одновременно могут иметь определенные значения, значит, все получающиеся состояния имеют определенную четность: *либо нечетные, либо четные*. Рассмотрим эти состояния поочередно.

### **Нечетные состояния.**

Запишем решения уравнений (3.3.28)  $\psi_<$  и (3.3.29)  $\psi_>$  для нечетных состояний

$$\begin{aligned} \psi_< &= A \sin kx \\ \psi_> &= \begin{cases} C \exp(-\alpha x), & x > a/2 \\ -C \exp(\alpha x), & x < -a/2 \end{cases} \end{aligned} \quad (3.3.32)$$

Бесконечно растущие решения в областях за пределами ямы не подходят, поскольку волновая функция стремится к бесконечности при  $x \rightarrow \pm\infty$ . Поэтому в (3.3.32) оставляем только затухающие решения. Таким образом, видно, что частица “проникает” в области вне ямы, при этом  $L \sim 1/\alpha$  – глубина проникновения частицы под барьер.

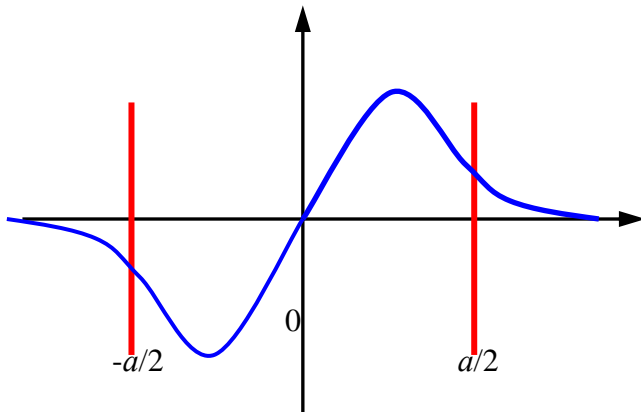


Рис. 3.5.

Из условия непрерывности волновой функции и ее производной на границе  $x = a/2$  получаем следующие соотношения:

$$\begin{cases} A \sin \frac{ka}{2} = C \exp\left(-\frac{\alpha a}{2}\right) \\ kA \cos \frac{ka}{2} = -\alpha C \exp\left(-\frac{\alpha a}{2}\right) \end{cases} \quad (3.3.33)$$

Простейшее решение (3.3.32) изображено на рисунке 3.5. Делением верхнего уравнения (3.3.33) на нижнее уравнение получаем:

$$\operatorname{tg} \frac{ka}{2} = -\frac{k}{\alpha} \quad (3.3.34)$$

Это уравнение, следующее из граничных условий, определяет энергии разрешенных состояний. То же самое уравнение получим в силу симметрии из граничного условия на другой границе при  $x = -a/2$ , поэтому его не рассматриваем. Введем следующее обозначение:

$$t = ka/2,$$

тогда для правой части (3.3.34) получаем из (3.3.29):

$$\frac{k}{\alpha} = \frac{t}{(a\alpha/2)} = \frac{t}{\sqrt{(ka/2)^2 - (ka/2)^2}} = \frac{t}{\sqrt{\tau^2 - t^2}},$$

где введен параметр *мощности ямы*:

$$\tau = \frac{a}{\hbar} \sqrt{\frac{mU_0}{2}}. \quad (3.3.35)$$

Итак, для определения спектра (разрешенных уровней энергии) будем решать трансцендентное уравнение:

$$\operatorname{tgt} = -\frac{t}{\sqrt{\tau^2 - t^2}} \quad (3.3.36)$$

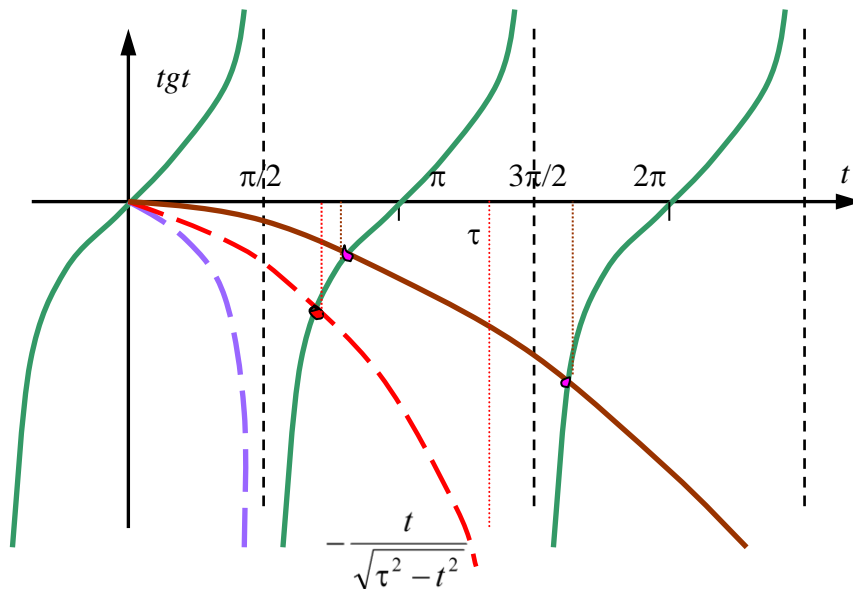


Рис. 3.6.

Решения этого уравнения можно проанализировать графически. Для этого на рис. 3.6 построим отдельно правую (голубая, красная и коричневая линии для различных значений  $\tau$ ) и левую (зеленые линии тангенса) части уравнения.

Точки пересечения дают корни уравнения (3.3.36). Из рис. 3.6 видно, что число решений зависит от мощности ямы  $\tau$ . Чем больше мощность ямы  $\tau$ , тем больше корней уравнения – больше разрешенных уровней энергии. При уменьшении  $\tau$  число корней уменьшается. А при мощности  $\tau < \pi/2$ , т.е. при следующих значениях

$$mU_0 a^2 < 2 \frac{\pi^2}{4} \hbar^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2},$$

корней соответствующих нечетным состояниям нет вовсе. При этом напомним, что  $t_0 = 0$  и  $E_0 = 0$  не являются корнями, т.к. при этом решение внутри ямы равно  $\psi_< = Ax$ , которое не удовлетворяет граничным условиям.

Итак, касаясь нечетных дискретных состояний, получаем следующее:

- А) При мощности ямы  $\tau < \pi/2$  нет дискретных состояний, т.е. когда  $U_0 \leq \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$
  - Б) При мощности ямы  $\pi/2 < \tau < 3\pi/2$  получаем 1 нечетное состояние
  - В) При мощности ямы  $3\pi/2 < \tau < 5\pi/2$  имеем 2 нечетных состояний
- и так далее.

### **Четные состояния.**

Запишем теперь решения уравнений (3.3.28)  $\psi_<$  и (3.3.29)  $\psi_>$  для четных состояний:

$$\begin{cases} \psi_< = B \cos kx \\ \psi_> = D \exp(-\alpha|x|) \end{cases} \quad (3.3.37)$$

На границе ямы при  $x = a/2$  запишем условия непрерывности для функции и производной:

$$\begin{cases} B \cos \frac{ka}{2} = D \exp\left(-\frac{\alpha a}{2}\right) \\ -kB \sin \frac{ka}{2} = -\alpha D \exp\left(-\frac{\alpha a}{2}\right) \end{cases} \quad (3.3.38)$$

Откуда получаем новое трансцендентное уравнение:

$$\operatorname{tg} \frac{ka}{2} = \frac{\alpha}{k} \quad (3.3.39)$$

В силу симметрии граничные условия при  $x = -a/2$  дают то же уравнение. Введя те же обозначения:  $t = ka/2$  и  $\tau = a/\hbar \cdot \sqrt{mU_0/2}$ , получаем следующее уравнение для определения спектра:

$$\operatorname{tgt} = \frac{\sqrt{\tau^2 - t^2}}{t} \quad (3.3.40)$$

Рассмотрим также графически возможные решения этого уравнения, построив отдельно правую и левую части уравнения на рис. 3.7. Точки пересечения дают корни этого уравнения. Правая в равенстве функция уменьшается от

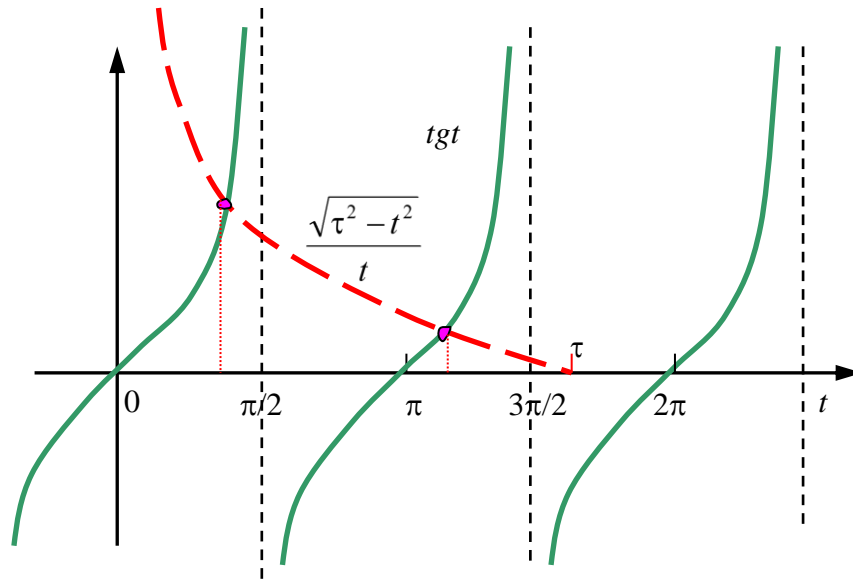


Рис. 3.7.

бесконечного значения при  $t = 0$  и обрывается при  $t = \tau$ . Из рисунка 3.7 видно, что при всех возможных значениях параметра  $\tau$  всегда есть хотя бы одно решение. Чем больше мощность ямы  $\tau$ , тем больше четных решений. Итак, получаем:

- 1) при мощности ямы  $\tau < \pi$  имеем 1 четное решение, т.е. при  $U_0 \leq 4 \cdot \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$
  - 2) при мощности  $\pi < \tau < 2\pi$  получаем 2 четных решения,
  - 3) при мощности  $2\pi < \tau < 3\pi$  получаем 3 четных решения,
- и так далее.

Для того чтобы яснее понять появление уровней в яме, рассмотрим “мелкую” яму, т.е. для которой параметр мощности  $\tau \ll 1$ . Для такой ямы достаточно легко найти энергию единственного четного состояния ( $t \leq \tau \ll 1$ ). Из (3.3.40), разложив тангенс в ряд, получаем:

$$t \operatorname{tg} t \approx t = \frac{\sqrt{\tau^2 - t^2}}{t}$$

Решая это уравнение и учитывая, что  $t$  и  $\tau$  одного порядка, имеем:

$$t^2 = \tau^2 - t^4 \approx \tau^2 - \tau^4$$

Далее вспоминая, что введенные параметры равны  $t = ka/2$  и  $\tau = a/\hbar \cdot \sqrt{mU_0/2}$ , записываем выражение для квадрата волнового числа:

$$k^2 = \frac{4}{a^2} t^2 \approx \frac{4}{a^2} \frac{a^2}{\hbar^2} \frac{mU_0}{2} \left( 1 - \frac{a^2}{\hbar^2} \frac{mU_0}{2} \right) = \frac{2mU_0}{\hbar^2} \left( 1 - \frac{a^2}{\hbar^2} \frac{mU_0}{2} \right)$$

Для энергии получаем:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \approx \frac{\hbar^2}{2m} \frac{2m}{\hbar^2} U_0 \left( 1 - \frac{ma^2}{2\hbar^2} U_0 \right) = U_0 \left( 1 - \frac{ma^2}{2\hbar^2} U_0 \right) \quad (3.3.41)$$

Получаем, что первый (четный) уровень энергии в мелкой яме  $\tau \ll 1$  находится у самого “верха” ямы. Иначе говоря  $E \approx U_0$ , хотя и чуть меньше этого значения на малую величину  $\tau^2 = \frac{ma^2}{2\hbar^2} U_0^2$ .

Подытожим полученное. Число уровней в одномерной яме с конечными стенками – конечно, но при этом всегда существует хотя бы одно связанное состояние. При малой глубине и ширине, иначе говоря мощности ямы, в яме

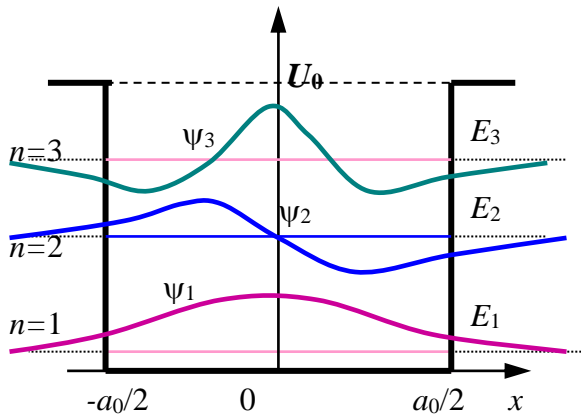


Рис. 3.8.

имеется только один уровень – четный уровень. С ростом  $U_0$  и  $a$  растет мощность ямы, и появляются новые уровни при прохождении параметром  $\tau$  значений  $\tau = \pi n/2$ , где  $n$  – целое число. Четные и нечетные уровни появляются по очереди, причем вначале четные. Уровни энергии  $E_n$  в спектре нумеруются главными квантовыми числами  $n = 1, 2, 3, \dots$ . Причем нечетным значениям  $n$  соответствуют четные состояния, а четным  $n$  – нечетные.

Качественное поведение волновых функции низших состояний показано на рисунке 3.8. Возводя в квадрат эти волновые функции, получаем плотность вероятности нахождения частицы при данной координате.

Важно отметить, что *частица может некоторое время существовать в классически запрещенной зоне*, где  $U_0 > E$ .

---

**Примечание 4.** В одномерной потенциальной яме хотя бы один уровень существует всегда, но это не так в трехмерной потенциальной яме. Для нее существование хотя бы одного уровня зависит от “мощности” потенциальной ямы:  $a^2 U_0$ , где  $U_0$  – глубина ямы, а  $a$  – ее размер. При малых мощностях ямы энергия частицы тоже должна быть малой, т.е. частица имеет большую длину волны де Бройля, и она как бы не “помещается” внутри ямы.

---

### 3.4. Потенциальные барьеры.

#### 3.4.1. Понятие потенциального барьера. Прямоугольная ступенька.

Одномерный потенциальный барьер определяется зависимостью потенциальной энергии от координаты  $U = U(x)$ . Если на каком-то участке координаты  $x$  потенциальная энергия возрастает (или падает), то говорят об одномерной потенциальной ступеньке (см рис. 4.1).

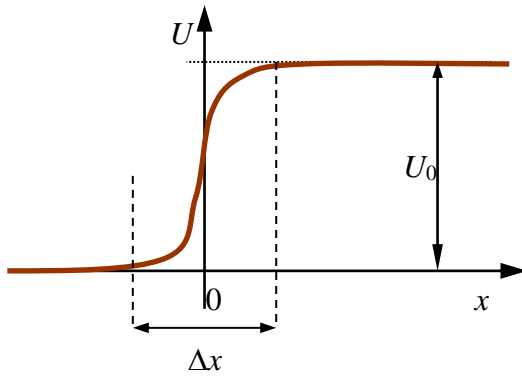


Рис. 4.1.

Напомним, что происходит при классическом рассмотрении этого процесса:

- 1) если энергия налетающей частицы  $E < U_0$ , тогда частица с достоверностью отражается от барьера и в правую область не проникает
- 2) если ее энергия  $E > U_0$ , тогда частица с достоверностью проходит над барьером и в правой области она движется с меньшей кинетической энергией  $E_1 = E - U_0$  и, соответственно, с меньшей скоростью  $v = 2/m\sqrt{E - U_0}$ .

В качестве примера рассмотрим такую задачу, когда на одномерную потенциальную ступеньку налетает частица с энергией  $E$ . При выполнении условия, что размер области изменения потенциальной энергии  $\Delta x$  мал по сравнению с волной де Бройля налетающей частицы:

$$\Delta x \leq \frac{2\pi\hbar}{mv}, \quad (3.4.1)$$

можно считать барьер достаточно быстро растущим и заменить его прямоугольным потенциальным барьером, изображенным на рис. 4.2. Его потенциальная энергия такой "ступеньки" записывается в виде:

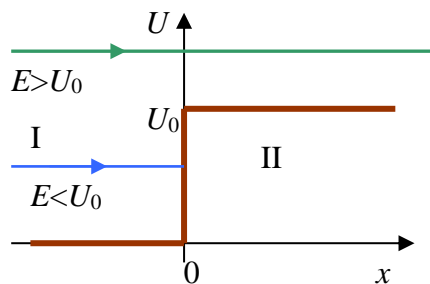


Рис. 4.2.

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_0, & x \geq 0 \end{cases} \quad (3.4.2)$$

В рамках квантовомеханического рассмотрения решается уравнение Шредингера в области до потенциального порога  $x < 0$  и после порога  $x > 0$ , а затем решения "сшиваются" на границе ( $x = 0$ ).

Будем рассматривать уравнение Шредингера для частицы с энергией  $E$  в двух областях пространства: в области I – до потенциальной ступеньки ( $-\infty < x < 0$ ) и в области II – после

ступеньки ( $x > 0$ ). При этом необходимо отдельно рассмотреть оба возможных случая, когда энергия частицы меньше величины барьера  $E < U_0$  и когда больше барьера  $E > U_0$ .

Этот вопрос удобно проработать самостоятельно, поскольку прямоугольная ступенька является частным случаем прямоугольного барьера, рассмотренного в следующем пункте этого параграфа (см также Сивухин Д.В., том 5, часть 1-ая. Атомная и ядерная физика §28). Итак, обратимся к задаче о частице, налетающей на прямоугольный потенциальный барьер.

### 3.4.2. Прямоугольный потенциальный барьер

Рассмотрим прямоугольный потенциальный барьер (см рис. 4.3). Его потенциальная энергия запишется:

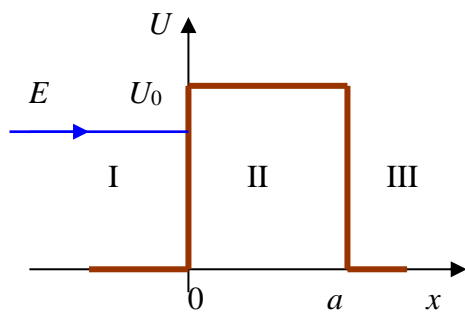


Рис. 4.3.

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_0, & 0 \leq x \leq a \\ 0, & x > 0 \end{cases} \quad (3.4.3)$$

В основном нас будет интересовать случай, когда падающие на барьер частицы имеют полную энергию меньшую, чем высота барьера:  $E < U_0$ . Это тот случай, когда по классической физике частица отразится от барьера и не проникнет в область  $x > 0$ .

Итак, пусть на барьер налетает поток частиц из бесконечности вдоль оси  $x$  (из  $-\infty$ ). Разобьем пространство на три части. Далее будем решать стационарное уравнение Шредингера последовательно в трех областях I, II и III, отмеченных на рис. 4.3.

В I и III областях имеем уравнение Шредингера, описывающее движение свободной частицы:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi, \quad \psi'' + k^2\psi = 0, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (3.4.4)$$

и его решения в этих областях записываются, соответственно:

$$\text{I область} \quad \psi(x) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx) \quad (3.4.5)$$

$$\text{III область} \quad \psi(x) = G \exp(ikx) + F \exp(-ikx) \quad (3.4.6)$$

Во II области имеем следующее уравнение:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U_0\psi = E\psi, \quad \psi'' - \alpha^2\psi = 0, \quad \alpha = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \quad (3.4.7)$$



и при условии  $E < U_0$  получаем следующее решение уравнения (3.4.7):

$$\text{II область} \quad \psi(x) = C \exp(\alpha x) + D \exp(-\alpha x) \quad (3.4.8)$$

Волна, описываемая экспонентой  $\exp(ikx)$ , распространяется в положительном направлении оси  $x$ , а волна, описываемая  $\exp(-ikx)$ , – в обратном направлении. В III области не будет волны, распространяющейся в обратном направлении оси  $x$ :  $F \exp(-ikx)$ , т.к. из области ( $x = \infty$ ) нет потока частиц, идущих к барьеру.

Итак, полное решение можно записать в виде:

$$\psi(x) = \begin{cases} A \exp(ikx) + B \exp(-ikx) & x < 0 \\ C \exp(\alpha x) + D \exp(-\alpha x) & 0 \leq x \leq a \\ G \exp(ikx) & x > a \end{cases} \quad (3.4.9)$$

Произведем сшивание волновых функций на границах барьера, поскольку полная волновая функция и ее первая производная должны быть непрерывны во всем пространстве. Условия на границах барьера образуют систему уравнений для определения коэффициентов  $A, B, C, D$  и  $G$ :

$$\text{При } x = 0 \quad \begin{cases} A + B = C + D \\ ik(A - B) = \alpha(C - D) \end{cases} \quad (3.4.10)$$

$$\text{При } x = a \quad \begin{cases} C \exp(\alpha a) + D \exp(-\alpha a) = G \exp(ika) \\ \alpha(C \exp(\alpha a) - D \exp(-\alpha a)) = ikG \exp(ika) \end{cases} \quad (3.4.11)$$

Введем коэффициенты *отражения* и *прохождения* как отношение плотностей потока вероятностей (2.6.8) (аналогично тому, как в оптике рассматривали плотности потока энергии для определения подобных коэффициентов):

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi). \quad (3.4.12)$$

В I области плотность потока *вправо* по оси  $x$  определяется через волну, распространяющуюся вдоль положительного направления оси  $x$ :  $\psi_1 = A \exp(ikx)$ . Подставляя ее в (3.4.12), имеем:

$$j_1 = \frac{i\hbar}{2m} (A^2 \exp(ikx)(-ik) \exp(-ikx) - A^2 \exp(-ikx)(ik) \exp(ikx)) = \frac{\hbar k}{m} A^2 \quad (3.4.13)$$

Плотность потока *влево* против оси  $x$  в I области определяется волной  $\psi_2 = B \exp(-ikx)$ :

$$j_2 = \frac{i\hbar}{2m} ikB^2 = -\frac{\hbar k}{m} B^2 \quad (3.4.14)$$

*Коэффициент отражения* определяют, как отношение плотностей потоков:

$$R = \left| \frac{j_2}{j_1} \right| = \left| \frac{B}{A} \right|^2 \quad (3.4.15)$$

Поток вероятности прошедшей волны определяется волновой функцией  $\psi = G \exp(ik_3x)$ ,  $k_3 = k_1$  и тогда *коэффициент прохождения* получаем аналогично как отношение потоков:

$$T = \left| \frac{j_3}{j_1} \right| = \left| \frac{k_3 G^2}{k_1 A^2} \right| = \left| \frac{G}{A} \right|^2 \quad (3.4.16)$$

Решая систему уравнений (3.4.10) - (3.4.11) и учитывая, что все коэффициенты в (3.4.9) выражаются через  $A$ , можно найти следующее выражение для коэффициента прохождения (см ниже Приложение 1):

$$T = \frac{4(\alpha/k)^2}{(1 + \alpha^2/k^2)^2 \operatorname{Sh}^2 \alpha a + 4\alpha^2/k^2} = \frac{1}{1 + \left( (1 + \alpha^2/k^2)^2 / 4\alpha^2/k^2 \right) \operatorname{Sh}^2 \alpha a}, \quad (3.4.17)$$

где гиперболический синус определяется:

$$\operatorname{Sh} x = \frac{e^x - e^{-x}}{2} \quad (3.4.18)$$

**Приложение 1.** Покажем, как получается одно из решений системы уравнений (3.4.10) - (3.4.11). В первой паре уравнений (3.4.10) сложим два уравнения, избавляясь от коэффициента  $B$ :

$$2A = -i \frac{\alpha}{k} (C - D) + C + D = C \left( 1 - i \frac{\alpha}{k} \right) + D \left( 1 + i \frac{\alpha}{k} \right)$$

Во второй паре уравнений (3.4.11) делим на  $\alpha$  второе уравнение, затем складываем и вычитаем, получая следующие два соотношения:

$$\begin{aligned} 2C e^{\alpha a} &= G e^{ika} \left( 1 + i \frac{k}{\alpha} \right) \\ 2D e^{-\alpha a} &= G e^{ika} \left( 1 - i \frac{k}{\alpha} \right) \end{aligned}$$

Выражая отсюда  $2C$  и  $2D$ , подставим их в предыдущее уравнение:

$$4A = \left( 1 - i \frac{\alpha}{k} \right) \left( 1 + i \frac{\alpha}{k} \right) G e^{ika - \alpha a} + \left( 1 + i \frac{\alpha}{k} \right) \left( 1 - i \frac{\alpha}{k} \right) G e^{ika + \alpha a}$$

Преобразуем, раскрывая скобки и перегруппировав:

$$4A = 2G e^{ika} (e^{\alpha a} + e^{-\alpha a}) + iG e^{ika} \left( \frac{\alpha}{k} - \frac{k}{\alpha} \right) (e^{\alpha a} - e^{-\alpha a})$$

Введем гиперболический косинус и гиперболический синус:

$$\operatorname{Ch} \alpha a = \frac{1}{2} (e^{\alpha a} + e^{-\alpha a}), \quad \operatorname{Sh} \alpha a = \frac{1}{2} (e^{\alpha a} - e^{-\alpha a})$$

Для них выполняется теорема Пифагора:

$$\operatorname{Ch}^2 \alpha a - \operatorname{Sh}^2 \alpha a = 1$$

Тогда получаем для  $2A$ :

$$2A = 2Ge^{ika}Ch\alpha a + iGe^{ika}\left(\frac{\alpha}{k} - \frac{k}{\alpha}\right)Sh\alpha a$$

Возведем по модулю в квадрат:

$$4A^2 = G^2 \left[ 4Ch^2\alpha a + \left(\frac{\alpha}{k} - \frac{k}{\alpha}\right)^2 Sh^2\alpha a \right]$$

Откуда раскрывая скобки и учитывая теорему Пифагора, получаем для отношения квадратов:

$$\frac{G^2}{A^2} = \frac{4}{4 + \left(\frac{\alpha}{k} + \frac{k}{\alpha}\right)^2 Sh^2\alpha a} = \frac{4\alpha^2/k^2}{\left(1 + \frac{\alpha^2}{k^2}\right)^2 Sh^2\alpha a + 4\frac{\alpha^2}{k^2}}$$

что совпадает с (3.4.17)

Энергетический коэффициент прохождения  $T$  можно выразить через энергию частицы  $E$  и высоту барьера  $U_0$ , используя отношение волновых чисел (3.4.4) и (3.4.7)

$$\alpha/k = \sqrt{(U_0 - E)/E} = \sqrt{U_0/E - 1}. \quad (3.4.19)$$

При этом получаем окончательное выражение для коэффициента прохождения:

$$T = \left(1 + \frac{U_0^2 Sh^2\alpha a}{4E(U_0 - E)}\right)^{-1} \quad (3.4.20)$$

Исследуем коэффициенты прохождения и отражения.

1) Коэффициент прохождения не равен нулю  $T \neq 0$  при полной энергии частицы меньшей высоты потенциального барьера  $E < U_0$ . Это явление называется **туннельным эффектом**. Качественно поведение волновой функции изображено на рис. 4.4. В классической физике ничего подобного нет, туннельная эффект – чисто квантовый эффект.

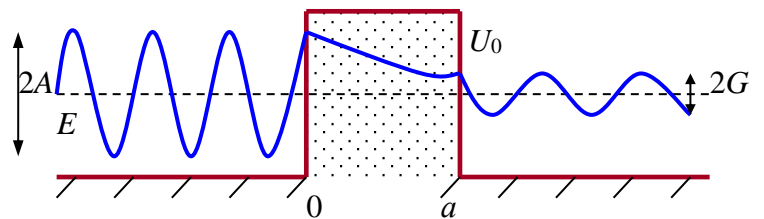


Рис. 4.4.

2) При условии  $\alpha a \gg 1$  можно упростить выражение для коэффициента прохождения  $T$ :

$$T \approx \frac{4(\alpha/k)^2 \cdot 2^2}{\left(1 + \alpha^2/k^2\right)^2 \exp(2\alpha a)} = \frac{16(\alpha/k)^2}{\left(1 + \alpha^2/k^2\right)^2} \exp\left(-\frac{2}{\hbar} a \sqrt{2m(U_0 - E)}\right) \quad (3.4.21)$$

Т.е. коэффициент прохождения определяется затухающей экспонентой:

$$T \sim \exp\left(-\frac{2}{\hbar} a \sqrt{2m(U_0 - E)}\right)$$

показатель которой зависит от ширины барьера и от разности между высотой барьера и полной энергии частицы. Чем выше эта разница, тем меньше коэффициент прохождения.

3) Коэффициент прохождения  $T$ , или вероятность туннелирования частицы через барьер, стремится к 0 в следующих предельных случаях:

- а)  $a \rightarrow \infty$  (т.е. в случае потенциальной прямоугольной ступеньки)
- б)  $U_0 \rightarrow \infty$  (случай бесконечно высокого барьера)
- в)  $m \rightarrow \infty$  (тяжелая частица)
- г)  $\hbar \rightarrow 0$  (переход к классическому рассмотрению)

4) Коэффициент отражения определяется соотношением (3.4.15):  $R = |B/A|^2$ . Подставляя решения системы уравнений (3.4.10)- (3.4.11), получаем выражение для коэффициента отражения частицы от барьера при энергии  $E < U_0$ :

$$R = \frac{\frac{(k^2 + \alpha^2)^2}{4k^2\alpha^2} Sh^2\alpha a}{1 + \frac{(k^2 + \alpha^2)^2}{4k^2\alpha^2} Sh^2\alpha a} = \frac{\frac{U_0^2 Sh^2\alpha a}{4E(U_0 - E)}}{1 + \frac{U_0^2 Sh^2\alpha a}{4E(U_0 - E)}} \quad (3.4.22)$$

5) Как и должно быть из закона сохранения потока вероятности, имеем:

$$R + T = 1. \quad (3.4.23)$$

Рассмотрим теперь кратко случай  $E > U_0$ .

При условии  $E > U_0$  решения получаются тем же путем, как и было сделано выше, только в области II имеем решение, описывающее движение свободной частицы с действительным волновым числом:

$$\alpha = \sqrt{2m(E - U_0)}/\hbar.$$

В результате решения мы получаем те же формулы для коэффициентов прохождения и отражения, в которых только параметр " $\alpha$ " меняем на " $i\alpha$ " (вследствие изменения знака под корнем в выражении (3.7.4)) и, соответственно, гиперболический синус " $Sh$ " на " $-iSin$ ":

$$T = \frac{4(\alpha/k)^2}{\left[1 - (\alpha/k)^2\right]^2 Sin^2\alpha a + 4(\alpha/k)^2} = \left(1 + \frac{\left[1 - (\alpha/k)^2\right]^2}{4(\alpha/k)^2} Sin^2\alpha a\right)^{-1} \quad (3.4.24)$$

$$R = \frac{[1 - (\alpha/k)^2]^2 \sin^2 \alpha a}{[1 - (\alpha/k)^2]^2 \sin^2 \alpha a + 4(\alpha/k)^2} \quad (3.4.25)$$

Таким образом, в общем случае даже при энергиях частицы выше высоты барьера мы получаем коэффициент отражения не равный нулю  $R \neq 0$ , а коэффициент прохождения  $T < 1$ .

Вывод состоит в том, что квантовая частица может отразиться от барьера и при энергии, превышающей величину барьера,  $E > U_0$ , когда по классической механике частица проходит с достоверностью, равной единице, над барьером.

Однако есть такие **характерные** энергии частицы, когда коэффициент отражения равен 0, а коэффициент прохождения равен 1. Эти энергии находятся из условия:

$$\sin \alpha a = 0 \Rightarrow \alpha a = n\pi \Rightarrow \alpha^2 = 2m(E - U_0)/\hbar^2$$

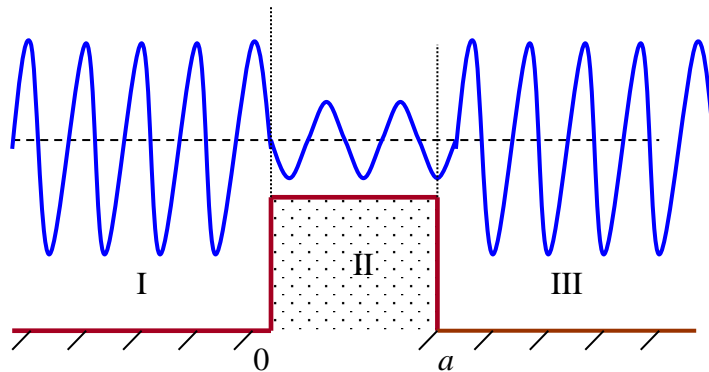


Рис. 4.5.

$$E_n = U_0 + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 \quad (3.4.26)$$

При таких энергиях  $E$  частица пролетает над барьером с достоверностью, равной единице, и в случае квантового рассмотрения. Заметим, что при этом **целое число полуволн де Бройля укладывается на ширине барьера**, чему соответствует условие  $\alpha a = n\pi$  (см рис. 4.5).

**Примечание 1.** Аналогичное решение для коэффициентов прохождения и отражения получаем для барьера в виде прямоугольной ямы (рис. 4.6), при этом в формулах меняется только " $U_0$ " на " $-U_0$ ". Отметим, что и в этой задаче в общем случае коэффициент отражения не равен нулю, хотя по классическим представлениям частица проходит над ямой с достоверностью. Коэффициент прохождения обращается в единицу

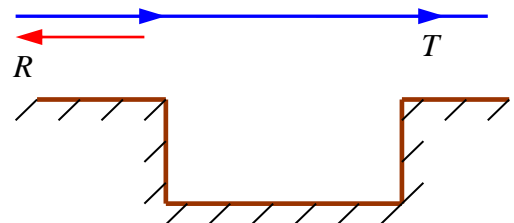


Рис. 4.6.

только для таких энергий, когда размер ямы соответствует целому числу полуволен де Бройля.

---

### 3.4.3. Барьер произвольной формы.

Если барьер имеет произвольную форму  $U = U(x)$ , то задача о прохождении частицы усложняется, однако часто такую задачу можно решить приближенно, когда величина барьера достаточно плавно меняется с расстоянием.

Пусть энергия частицы  $E = const$  и тогда равенство  $E = U(x)$  определяет 2 точки  $a$  и  $b$ , где частица классически “входит” под барьер и “выходит” из барьера (см рис. 4.7). Сам барьер можно представить в виде суммы прямоугольных барьеров, причем

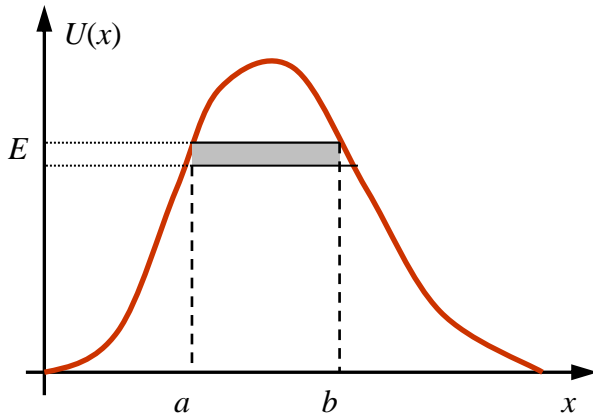


Рис. 4.7.

причем прохождение каждого из них рассматривать отдельно как это делали ранее.

Приближенно задачу можно решить, если барьеры достаточно широкие, и при этом импульс  $p(x)$  и соответствующая волна де Бройля  $\lambda = 2\pi\hbar/p(x)$  медленно меняются на расстоянии  $\sim \lambda$ . Это условие математически записывается в следующем виде:

$$\lambda \left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll \lambda \tag{3.4.27}$$

Соотношение (3.4.27) определяет условие применения, так называемого *квазиклассического приближения*. В самом деле, воспользуемся описанием изменения волновой функции при распространении частицы в пространстве с постоянным потенциалом, а именно:

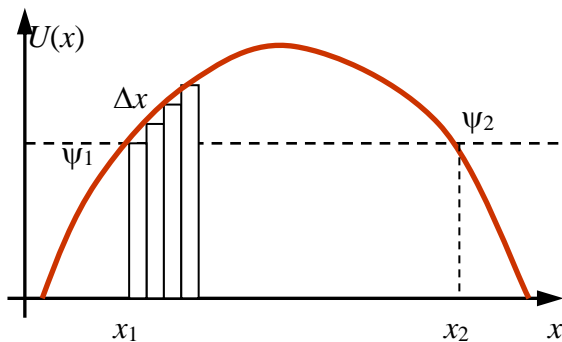


Рис. 4.8.

$$\psi(x) = \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar} px}$$

где  $p(x) = const$  (здесь временной множитель  $e^{\frac{i}{\hbar} Et}$  опустили, т.к. он не существен для определения координатной зависимости).

Разбивая барьер на маленькие прямоугольные барьеры шириной  $\Delta x$ , как показано на рис. 4.8, можно

считать, что на ширине  $\Delta x$  такого барьера  $U(x) = const$  и импульс частицы не меняется

$$p(x) = \sqrt{2m(E - U)} \approx const.$$

Тогда можно записать последовательное приближенное изменение волновой функции при переходе от одного узкого барьера к другому:

$$\psi(x + \Delta x) \approx \psi(x) e^{\frac{i}{\hbar} p(x) \Delta x}$$

$$\psi(x + 2\Delta x) \approx \psi(x + \Delta x) e^{\frac{i}{\hbar} p(x + \Delta x) \Delta x}$$

$$\psi(x + 3\Delta x) \approx \psi(x + 2\Delta x) e^{\frac{i}{\hbar} p(x + 2\Delta x) \Delta x}$$

и так далее.....

Складывая все изменения волновой функции на каждом барьере, получаем связь волновой функции  $\psi_2$  на выходе из барьера с волновой функцией  $\psi_1$  на входе в барьер:

$$\psi_2 \approx \psi_1 \exp\left(\frac{i}{\hbar} [p(x)\Delta x + p(x + \Delta x)\Delta x + p(x + 2\Delta x)\Delta x + \dots]\right) = \psi_1 \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx\right) \quad (3.4.28)$$

Коэффициент прохождения через барьер произвольной формы приближенно равен отношению квадратов амплитуд:

$$T \approx \left| \frac{\psi_2}{\psi_1} \right|^2 \approx \left| \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx\right) \right|^2 = \left| \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx\right) \right|^2$$

Здесь в интеграле под корнем мы поменяли местами потенциальную и полную энергии частицы. Окончательно коэффициент прохождения равен:

$$T = T_0 \exp\left\{-\frac{2}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m(U(x) - E)} dx\right\} \quad (3.4.29)$$

Это выражение позволяет найти коэффициент прохождения через барьер произвольной формы в квазиклассическом приближении.

### 3.5. Физические явления, связанные с туннельным эффектом.

#### 3.5.1. Контактная разность потенциалов.

Электронную структуру металлических образцов рассматриваем с точки зрения простейшей модели металла: валентные и делокализованные электроны находятся в поле потенциальной ямы с конечными стенками, образованной положительными ионами решетки. Делокализованные

электроны движутся в усредненном потенциальном поле ионов и заполняют уровни энергии от дна потенциальной ямы до максимальной энергии – энергии Ферми.

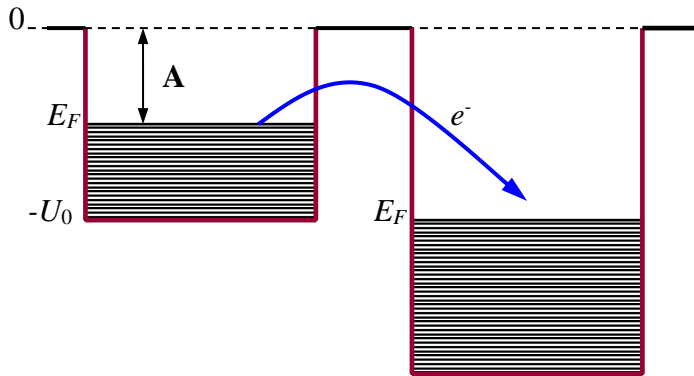


Рис. 5.1.

Глубина потенциальной ямы и уровень Ферми для различных металлов в принципе имеют разную энергию. Сблизим 2 куса разных металлов друг с другом так, чтобы зазор между ними стал небольшим – порядка размеров атома ( $\sim 10^{-8}$  см). Тогда между двумя металлами возникает узкий потенциальный барьер, через который электроны с большой вероятностью могут туннелировать, т.е. переходить из одного металла в другой на свободные уровни выше уровня Ферми (см рис. 5.1). Так будет происходить до тех пор, пока не установится статистическое равновесие. Это равновесие установится, когда уровни Ферми обоих металлов сравняются. Но при этом электрические потенциалы металлов изменятся, так как заряд переходит с одного металла на другой, и, следовательно, *возникает контактная разность потенциалов*.

### 3.5.2. Явление холодной эмиссии.

При приложении к поверхности металла внешнего электрического поля ( $\sim 10^6$  В/см), с поверхности металла вылетают электроны. Такая эмиссия называется *холодной эмиссией*.

Будем отсчитывать потенциальную энергию от дна потенциальной ямы, описывающей состояние валентных электронов в металле. При нормальных условиях работа выхода равна  $A = U_0 - E_F$  (см рис. 5.2), т.е. электрон должен получить энергию  $E \geq A$ , чтобы оказаться в области  $x > 0$

При включении внешнего электрического поля напряженностью  $E$  потенциальная энергия на границе металл-вакуум определяется

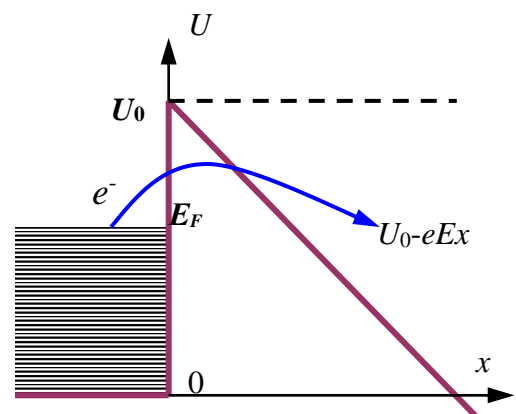


Рис. 5.2.



$$U(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ U_0 - eEx & x > 0 \end{cases}$$

Возникает потенциальный барьер между металлом и вакуумом для электронов, находящихся в металле, как показано на рис. 5.2. При этом электроны с заполненных энергетических уровней в металле могут проходить под барьером («туннелировать») и переходить из объема металла в пространство за поверхностью металла, где будут ускоряться во внешнем электрическом поле. Явление холодной эмиссии – яркое доказательство проявления туннельного эффекта.

Чем сильнее напряженность электрического поля, тем больше выход электронов. На этом принципе разработан *туннельный микроскоп*. Тонкая игла сканирует поверхность вещества и одновременно создает электрическое поле. За счет туннельного эффекта электроны переходят с поверхности на иглу, что можно фиксировать возникающим током в цепи, связанной с иглой. Чем меньше расстояние от иглы до поверхностных атомов (молекул или структурных особенностей), тем сильнее туннельный эффект и возникающий ток.

### 3.6. Линейный гармонический осциллятор.

#### 3.6.1. Классический осциллятор.

Задача об осцилляторе одна из самых важных задач в механике, электромагнетизме и в квантовой механике. Сложное периодическое или колебательное движение можно свести к совокупности так называемых нормальных колебаний, эквивалентных колебаниям гармонического осциллятора (см [1], Глава 4).

Напомним рассмотрение осциллятора в классической механике. Упругая возвращающая сила равна  $F = -kx$ , при этом уравнение Ньютона имеет вид

$$m\ddot{x} = -kx, \quad (3.6.1)$$

или иначе, уравнение, описывающее гармоническое колебательное движение (осциллятор):

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0, \quad (3.6.2)$$

где частота колебаний  $\omega = \sqrt{k/m}$ . Решение уравнения (3.6.2) имеет вид:

$$x = a \cos(\omega t + \varphi). \quad (3.6.3)$$

Ранее в курсе электромагнетизма (см [4], Глава 1, §1.10) также получали интенсивность (мощность) излучения ускоренно движущегося заряда:

$$P(t) = \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \ddot{x}^2. \quad (3.6.4)$$

Средняя интенсивность излучения есть мощность излучения:

$$\langle P \rangle = \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \langle (\ddot{x})^2 \rangle = \frac{e^2 a^2 \omega^4}{3c^3} \quad (3.6.5)$$

Энергия гармонического осциллятора равна:

$$E = T + U = \frac{m\dot{x}^2}{2} + \frac{kx^2}{2} \Rightarrow \frac{m\omega^2 a^2}{2} \quad (3.6.6)$$

Тогда мощность излучения пропорциональна энергии осциллятора

$$\langle P \rangle = \frac{2e^2 \omega^2}{3mc^3} E \quad (3.6.7)$$

В классической механике колебательное движение характеризуется следующими параметрами: 1) интенсивность излучения, 2) частота излучения, 3) энергия осциллятора. При этом отметим, что энергия осциллятора может принимать произвольное значение.

### 3.6.2. Квантовый осциллятор.

Потенциальная энергия одномерного гармонического осциллятора, изображенная на рис. 6.1, записывается в виде ([1], Глава 4)

$$U(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2.$$

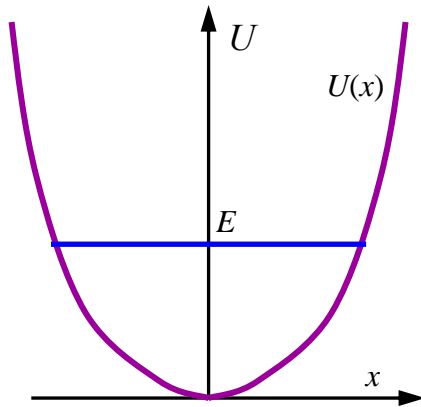


Рис. 6.1.

Задачу о квантовом одномерном осцилляторе решим точно, разбивая ее решение на отдельные этапы.

Уравнение Шредингера для одномерного осциллятора имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \psi(x) = E \psi(x) \quad (3.6.8)$$

Граничные условия состоят в том, что волновая функция убывает на больших расстояниях:

$$\psi(\pm\infty) = 0. \quad (3.6.9)$$

Из качественных физических представлений получаем, что в области энергий  $E > U$  решение должно иметь вид “плоских волн”, но искаженных зависимостью потенциала от координаты, а в “запрещенной” области  $E < U$  — затухающие решения. Перепишем уравнение (3.6.8) в виде:

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \psi = 0 \quad (3.6.10)$$

Для упрощения записи и решения уравнения введем новые обозначения переменных и констант. Так, введем безразмерную константу  $\lambda$

$$\lambda \equiv \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (3.6.11)$$

и вместо координаты  $x$  переменную  $\xi$

$$\xi = x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \quad \text{или} \quad x^2 = \frac{\hbar}{m\omega} \xi^2. \quad (3.6.12)$$

Вычисляя производные

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{d\psi}{d\xi} \frac{d\xi}{dx} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \psi'_\xi, \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{m\omega}{\hbar} \psi''_\xi, \quad (3.6.13)$$

подставляем их в (3.6.10). Сокращая, получаем следующее уравнение:

$$\psi''_\xi + (\lambda - \xi^2) \psi = 0 \quad (3.6.14)$$

Последовательное решение этого уравнения представлено ниже в [Приложении 1](#).

[Приложение 1](#). Исследуем и решим уравнение (3.6.14) поэтапно.

1) Асимптотическое решение уравнения. Рассмотрим асимптотические решения при  $\xi \rightarrow \pm\infty$ . Тогда уравнение приобретает вид:

$$\psi''_\infty - \xi^2 \psi_\infty = 0 \quad (3.6.15)$$

Ищем решение (3.6.15) в виде:

$$\psi_\infty = \exp(\gamma \xi^2), \quad (3.6.16)$$

где  $\gamma$  – постоянная. При этом вторая производная равна

$$\psi''_\infty = 2\gamma(2\gamma\xi^2 + 1) \exp(\gamma\xi^2).$$

Здесь еще раз воспользуемся тем, что  $\xi \rightarrow \pm\infty$ , тогда вторая производная равна:

$$\psi''_\infty \approx 4\gamma^2 \xi^2 \exp(\gamma\xi^2). \quad (3.6.17)$$

Подставляем (3.6.17) в уравнение (3.6.15):

$$4\gamma^2 \xi^2 \exp(\gamma\xi^2) - \xi^2 \exp(\gamma\xi^2) = 0$$

Откуда получаем параметр  $\gamma$ :

$$\gamma = \pm \frac{1}{2} \quad (3.6.18)$$

Тогда асимптотическое решение уравнения имеет вид линейной комбинации двух решений, соответствующих двум значениям параметра  $\gamma$ :

$$\psi_\infty(\xi) = C_1 \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) + C_2 \exp\left(\frac{\xi^2}{2}\right)$$

Исходя из граничных условий (3.6.9): при  $\xi \rightarrow \pm\infty$  должно быть  $\psi \rightarrow 0$ , тогда получаем  $C_2 = 0$ . Итак, решение на бесконечности (коэффициент перед экспонентой не существует) имеет вид затухающей экспоненты:

$$\psi_\infty(\xi) = \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \quad (3.6.19)$$

2) Выделение асимптотического решения из общего решения. Ищем решение в виде произведения:

$$\psi = \psi_\infty(\xi) \cdot u(\xi) = \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \cdot u(\xi) \quad (3.6.20)$$

Снова считаем вторую производную:

$$\begin{aligned} \psi''_\xi &= \left( -\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}} u(\xi) + e^{-\frac{\xi^2}{2}} u'(\xi) \right)'_\xi = e^{-\frac{\xi^2}{2}} \left[ -u(\xi) - \xi u'(\xi) + \xi^2 u(\xi) - \xi u'(\xi) + u''(\xi) \right] = \\ &= e^{-\frac{\xi^2}{2}} \left[ u'' - 2\xi u' + (\xi^2 - 1)u \right] \end{aligned} \quad (3.6.21)$$

Подставляя в уравнение (3.6.14) получаем уравнение для функции  $u(\xi)$ :

$$u'' - 2\xi u' + (\lambda - 1)u = 0 \quad (3.6.22)$$

3). Решение в виде ряда. Решение уравнения (3.6.22) ищем в виде ряда по степеням  $\xi$ :

$$u(\xi) = b_\nu \xi^\nu + b_{\nu+1} \xi^{\nu+1} + b_{\nu+2} \xi^{\nu+2} + \dots = \sum_{k=\nu}^{\infty} b_k \xi^k \quad (3.6.23)$$

Начальную степень  $\nu$  определим из условия, чтобы  $u(\xi)$  нигде в бесконечность не обращалась. Подставим (3.6.23) в (3.6.22), предварительно сосчитав производные:

$$\begin{aligned} u'(\xi) &= \sum_{k=\nu}^{\infty} k b_k \xi^{k-1} \\ u''(\xi) &= \sum_{k=\nu}^{\infty} k(k-1) b_k \xi^{k-2} \end{aligned}$$

Тогда получаем: 
$$\sum_{k=\nu}^{\infty} k(k-1) b_k \xi^{k-2} - 2\xi \sum_{k=\nu}^{\infty} k b_k \xi^{k-1} + (\lambda - 1) \sum_{k=\nu}^{\infty} b_k \xi^k = 0$$

или

$$\sum_{k=\nu}^{\infty} \left[ k(k-1) b_k \xi^{k-2} - 2k b_k \xi^k + (\lambda - 1) b_k \xi^k \right] = 0 \quad (3.6.24)$$

Приравнявая нулю слагаемые с одинаковыми степенями  $\xi - \xi^k$ , определяем начальные степени искомого ряда :

$$1) \text{ при } k = \nu \quad \nu(\nu - 1) b_\nu \xi^{\nu-2} = 0,$$

откуда получаем:  $\nu = 0$  или  $\nu = 1$ .

$$2) \text{ при } k = \nu + 1 \quad (\nu + 1) \nu b_{\nu+1} \xi^{\nu-1} = 0,$$

откуда получаем  $\nu = 0$ , что не дает ничего нового, или  $\nu = -1$ .

Однако начало ряда со степени  $\nu = -1$  не годится, поскольку слагаемое  $\xi^{-1}$  расходится при стремлении  $\xi$  к нулю  $\xi \rightarrow 0$ .

В общем случае из равенства нулю коэффициентов при одинаковых степенях  $\xi^k$  имеем:

$$(k+2)(k+1)b_{k+2}\xi^{k-2+2} + (\lambda-1-2k)b_k\xi^k = 0$$

и тогда получаем рекуррентное соотношение для коэффициентов:

$$b_{k+2} = \frac{2k+1-\lambda}{(k+2)(k+1)}b_k \quad (3.6.25)$$

Общее рекуррентное соотношение позволяет вычислить коэффициенты ряда через единицу. Ряды могут начинаться с  $v=0$  (четные степени  $\xi$ ) или с  $v=1$  (нечетные степени  $\xi$ ). Итак, имеем 2 возможных решения (3.6.22) в виде двух рядов:

$$\begin{cases} u_1 = b_0 + b_2\xi^2 + b_4\xi^4 + b_6\xi^6 + \dots \\ u_2 = b_1\xi^1 + b_3\xi^3 + b_5\xi^5 + b_7\xi^7 \dots \end{cases} \quad (3.6.26)$$

в которых коэффициенты связаны рекуррентными соотношениями (3.6.25).

4). Исследование рядов. Оказывается, что ряды (3.6.26) расходятся. В самом деле, исследуем их поведение при  $\xi \rightarrow \infty$ . Вначале рассмотрим ряд, который определенно расходится при  $\xi \rightarrow \infty$ :

$$e^{\xi^2} = 1 + \frac{\xi^2}{1!} + \frac{\xi^4}{2!} + \frac{\xi^6}{3!} + \dots + \frac{\xi^\tau}{\left(\frac{\tau}{2}\right)!} + \frac{\xi^{\tau+2}}{\left(\frac{\tau+2}{2}\right)!} + \dots \quad (3.6.27)$$

Возьмем отношение коэффициентов этого ряда при высоких членах  $\tau \gg 1$ :

$$\frac{a_{\tau+2}}{a_\tau} = \frac{(\tau/2)!}{\left(\frac{\tau+2}{2}\right)!} = \frac{1}{\frac{\tau}{2}+1} \approx \frac{2}{\tau} \quad (3.6.28)$$

Возьмем также отношение коэффициентов из рекуррентной формулы (3.6.25):

$$\frac{b_{k+2}}{b_k} = \frac{2k+1-\lambda}{(k+2)(k+1)} \approx \frac{2k}{k^2} = \frac{2}{k} \quad (3.6.29)$$

Из сравнения поведения коэффициентов получаем, что отличие нашего ряда (3.6.26) от ряда (3.6.27) может быть только в постоянном множителе. Иначе так же как ряд (3.6.27), наш ряд (3.6.26) расходится:

$$u(\xi) \Rightarrow \exp(\xi^2) \rightarrow \infty \\ \text{при } \xi \rightarrow \infty$$

Итак, ряд (3.6.26) расходится, как  $\exp(\xi^2)$ , а общее решение  $\psi(\xi)$ , следовательно, расходится как  $\exp(\xi^2/2)$ , что следует из формулы (3.6.20). Такое решение не удовлетворяет очевидным граничным условиям (3.6.9).

Означает ли это, что решений вообще нет? Нет, не означает! Решение существует, если ряд (3.6.26) оборвать и сделать конечным. Оборвать ряд  $u$  можно с помощью выбора параметра  $\lambda$  (3.6.11). Оборвать ряд – это означает приравнять коэффициент  $b_{k+2}$  в соотношении (3.6.25) нулю:  $b_{k+2} = 0$ , откуда получаем следующее условие:

$$2k+1-\lambda = 0$$

И поскольку  $k$  есть порядковый номер членов ряда, то это есть целое число, и тогда  $\lambda$  также целое число. Для параметра  $\lambda$  можно записать выражение:

$$\lambda = 2n + 1, \quad \text{где } n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (3.6.30)$$

Чтобы решение уравнения (3.6.14) существовало и имело бы физический смысл, то параметр  $\lambda$  должен быть целым числом

$$\lambda = 2n + 1, \quad \text{где } n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (3.6.30)$$

Вспоминая выражение для параметра  $\lambda$  (3.6.11), получаем разрешенные уровни энергии  $E_n$  из условия  $E = 1/2 \cdot \lambda \hbar \omega$ :

$$E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad (3.6.31)$$

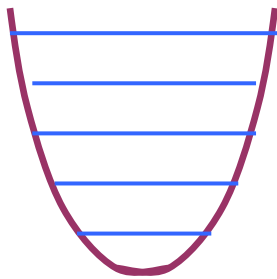


Рис. 6.2.

где  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

Итак, получаем **спектр энергий одномерного осциллятора**, – энергия квантуется, и уровни энергии находятся на одинаковом расстоянии друг от друга – **эквидистантный спектр** (см рис. 6.2). **Расстояние между уровнями равно энергии кванта  $\hbar \omega$** . Низший уровень энергии отличен от нуля и составляет половину энергии кванта  $\hbar \omega$ .

Обратимся к волновым функциям этих энергетических состояний, которые характеризуются квантовым числом  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$  и которые можно записать в виде (3.6.20)

$$\psi_n = \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \cdot u_n(\xi)$$

Получающиеся конечные ряды для функции  $u_n(\xi)$  называются **полиномами Эрмита** и обозначаются  $H_n(\xi)$ . Для нескольких значений  $n$  имеем:

$$\begin{aligned} n = 0 & & H_0(\xi) &= 1 \\ n = 1 & & H_1(\xi) &= 2\xi \\ n = 2 & & H_2(\xi) &= 4\xi^2 - 2 \\ n = 3 & & H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi \end{aligned}$$

и так далее. Коэффициенты в полиномах Эрмита для удобства выбраны так, что коэффициент при максимальной степени переменной  $\xi$  равен  $b_n = 2^n$ . Все остальные коэффициенты  $b_k$  в ряду тогда определяются рекуррентной формулой (3.6.25), в которой  $\lambda = 2n+1$ :

$$b_{k-2} = \frac{k(k-1)}{2k-4-2n} b_k = -\frac{k(k-1)}{2(n-k+2)} b_k \quad (3.6.32)$$

Уравнение, которому подчиняются полиномы Эрмита, является частным случаем уравнения (3.6.22):

$$H_n'' - 2\xi H_n' + 2nH_n = 0 \quad (3.6.33)$$

Решение этого уравнений представляется:

$$H_n(\xi) = (2\xi)^n - \frac{n(n-1)}{1!} (2\xi)^{n-2} + \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!} (2\xi)^{n-4} + \dots + \begin{cases} b_1 \xi & n - \text{четное} \\ b_0 & n - \text{нечетное} \end{cases} \quad (3.6.34)$$

Можно привести замкнутую формулу для получения полиномов Эрмита:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \quad (3.6.35)$$

Итак, окончательно *полное решение уравнения Шредингера для одномерного осциллятора* имеет вид:

$$\psi_n(\xi) = C_n \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \cdot H_n(\xi), \quad \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad (3.6.36)$$

Коэффициенты  $C_n$  находят из условия нормировки:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(\xi)|^2 d\xi = 1$$

Вычисляя соответствующие интегралы (**см ниже Приложение 2**), получаем следующее выражение для коэффициентов:

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\hbar\pi/m\omega}} \quad (3.6.37)$$

Запишем несколько волновых функций, описывающих наиболее низкие по энергии состояния частицы в одномерном осцилляторе:

$$\begin{aligned} \psi_0(\xi) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) \\ \psi_1(\xi) &= \left(\frac{m\omega}{4\pi\hbar}\right)^{1/4} 2\xi \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) = \frac{2^{1/2}}{\pi^{1/4}} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{3/4} \cdot x \cdot \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) \\ \psi_2(\xi) &= \left(\frac{m\omega}{4\pi\hbar}\right)^{1/4} (2\xi^2 - 1) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \\ \psi_3(\xi) &= \left(\frac{m\omega}{9\pi\hbar}\right)^{1/4} \xi (2\xi^2 - 1) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \end{aligned}$$

На рисунке 6.3 изображены волновые функции  $\psi_n$  осциллятора (сплошные линии) и соответствующие плотности распределения вероятностей  $|\psi_n|^2$  (красный пунктир).

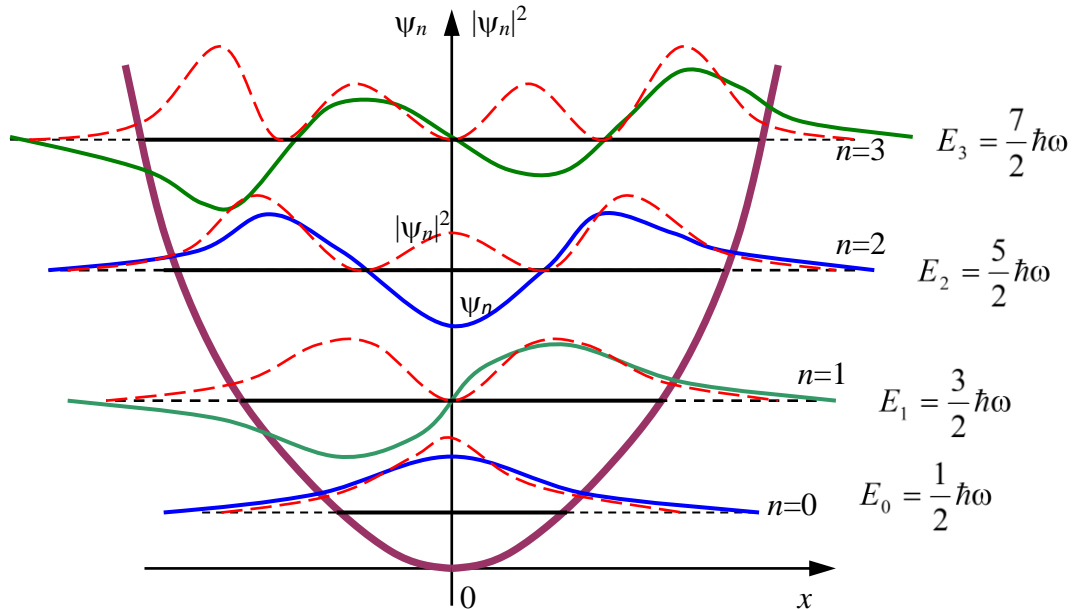


Рис. 6.3.

Из решения (3.6.34) видно, что имеются четные и нечетные состояния. Внутри области  $E > U$  имеем осцилляционное поведение волновых функций, напоминающее поведение свободной частицы, но, очевидно, искаженное изменяющейся с координатой  $x$  потенциальной энергией. Отметим, что с ростом энергии волновые функции и плотности вероятности испытывают

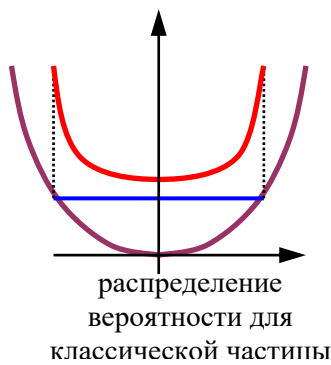


Рис. 6.4.

большее число осцилляций внутри “классически разрешенной” области. Рост осцилляций обеспечивает ортогональность волновых функций разных состояний. При этом возрастает амплитуда и вероятность нахождения частицы у границы потенциала. Это не удивительно, так как с ростом номера уровня распределение плотности вероятности приближается к классическому распределению вероятности нахождения частицы внутри такой ямы (см рис. 6.4).

В квантовой механике для осциллятора возможны переходы частицы между соседними уровнями с излучением света частоты  $\omega$  или, что то же, фотона энергии  $\hbar\omega$ . На первый взгляд в квантовом осцилляторе возможно излучение со всеми частотами кратными  $\omega$ :  $N\omega$ , где  $N$  целое число. В старой квантовой теории Н. Бор вводил *правила отбора*:  $\Delta n = \pm 1$ , т.е. переход с излучением происходит только с соседних уровней. Эти правила отбора сохраняются и в квантовой механике: они получаются при



вычисления вероятности перехода осциллятора с одного уровня на другой с излучением или поглощением фотона:

$$\begin{aligned}\Delta n &= \pm 1 \\ E_{\text{фотон}} &= \hbar\omega\end{aligned}\quad (3.6.38)$$

Таким образом, квантовый осциллятор, определяемый потенциальной энергией  $U(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ , излучает фотоны с определенной энергией  $\hbar\omega$ .

**Примечание 1.** Иногда удобно ввести параметр длины  $x_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$ , и тогда волновые функции имеют вид:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi} x_0}} \exp\left(\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2\right) H_n\left(\frac{x}{x_0}\right)$$

**Приложение 2.** Нормировка волновых функций одномерного осциллятора. Нормировку проще получить, используя замену (3.6.12):

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)| dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(\xi)| d\xi = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{2}} C_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n^2(\xi) d\xi = 1$$

Подставим в интеграл выражение для одного из полиномов Эрмита из замкнутой формулы (3.6.35):

$$(-1)^n \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{2}} C_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} e^{\xi^2} H_n(\xi) \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} d\xi = (-1)^n \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{2}} C_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi) \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} d\xi = 1$$

Интеграл можно взять  $n$  раз по частям, при этом все свободные члены обращаются в нуль на бесконечности из-за убывания волновой функции. Тогда имеем:

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi) \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} d\xi = (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} H_n(\xi) d\xi$$

Воспользуемся выражением для полинома Эрмита в виде ряда (3.6.34), и тогда видно, что в результате дифференцирования получаем:

$$\frac{d^n H_n(\xi)}{d\xi^n} = 2^n n!$$

Тогда под интегралом остается только экспоненциальная функция, и интеграл представляет собой известный табличный интеграл:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\xi^2) d\xi = \sqrt{\pi}$$

Подставляя все в нормировочный интеграл, получаем:

$$(-1)^n (-1)^n \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{2}} C_n^2 2^n n! \sqrt{\pi} = 1$$

Окончательно находим нормировочный множитель:  $C_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\hbar\pi/m\omega}}}$

**Примечание 2.** Аналогично можно показать, что волновые функции с разными  $n$  ортогональны:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = \delta_{mn}$$


---

### 3.6.3. Операторный подход к задаче о квантовом осцилляторе.

Покажем решение задачи о квантовом одномерном осцилляторе в рамках операторного подхода. Решаем уравнение Шредингера (3.6.8), которое запишем через оператор проекции импульса  $\hat{p}_x \equiv \hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ :

$$\hat{H}\psi \equiv \frac{\hat{p}^2}{2m} \psi(x) + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \psi(x) = E\psi(x)$$

Введем операторы:

$$\hat{a} = \frac{\hat{p} - im\omega x}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \quad (3.6.39)$$

$$\hat{a}^+ = \frac{\hat{p} + im\omega x}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \quad (3.6.40)$$

Найдем последовательное действие этих операторов на произвольную функцию, стоящую справа от него:

$$\hat{a}^+ \hat{a} = \frac{1}{\hbar\omega} \left( \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} - \frac{i\omega}{2} [\hat{p}x - x\hat{p}] \right) = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \quad (3.6.41)$$

Видно, что последовательное действие операторов  $\hat{a}^+ \hat{a}$  выражается через действие оператора Гамильтона  $\hat{H}$ . Аналогично получаем их действие в обратном порядке:

$$\hat{a} \hat{a}^+ = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega} + \frac{1}{2} \quad (3.6.42)$$

Тогда гамильтониан осциллятора  $\hat{H}$  можно записать:

$$\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \quad (3.6.43)$$

Сосчитаем коммутатор операторов  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^+$

$$[\hat{a} \hat{a}^+] = \hat{a} \hat{a}^+ - \hat{a}^+ \hat{a} = 1 \quad (3.6.44)$$

Физический смысл введенных операторов:  $\hat{a}$  – *оператор уничтожения*,  $\hat{a}^+$  – *оператор рождения*. В самом деле, действие операторов на волновые функции, являющиеся собственными функциями гамильтониана:

$$\hat{H}\psi_E = E\psi_E \quad (3.6.45)$$

приводит к новым собственным функциям гамильтониана с собственными значениями меньшими или большими на энергию  $\hbar\omega$

$$\hat{a}\psi_E \Rightarrow \psi_{E-\hbar\omega} \quad \text{и} \quad \hat{a}^+\psi_E \Rightarrow \psi_{E+\hbar\omega}$$

Проверим это

$$\hat{H}\hat{a}\psi_E = \left( \hbar\omega\hat{a}\hat{a}^+ - \frac{\hbar\omega}{2} \right) \hat{a}\psi_E = \hat{a} \left( \hbar\omega\hat{a}^+\hat{a} - \frac{\hbar\omega}{2} \right) \psi_E = \hat{a}(\hat{H} - \hbar\omega)\psi_E = (E - \hbar\omega)\hat{a}\psi_E = (E - \hbar\omega)\psi_{E-\hbar\omega}$$

Аналогично получаем:

$$\hat{H}\hat{a}^+\psi_E = (E + \hbar\omega)\hat{a}^+\psi_E = (E + \hbar\omega)\psi_{E+\hbar\omega} \quad (3.6.46)$$

Рассмотрим основное состояние, т.е. состояние с наименьшей энергией  $E_0$ , описываемое волновой функцией  $\psi_0$ . Тогда действие оператора уничтожения на  $\psi_0$  равно нулю (поскольку нет состояния с меньшей энергией):

$$\hat{a}\psi_0 = 0 \quad (3.6.47)$$

Или, добавив действие оператора рождения, имеем из (3.6.41):

$$\hat{a}^+\hat{a}\psi_0 = \left( \frac{\hat{H}}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \right) \psi_0 = 0$$

Откуда получаем уравнение на собственные значения и собственные функции оператора энергии:

$$\hat{H}\psi_0 = \hbar\omega/2 \cdot \psi_0 \quad (3.6.48)$$

$$E_0 = \hbar\omega/2 \quad (3.6.49)$$

А последующие уровни получаются действием операторов рождения на функцию  $\psi_0$ . Получаем спектр энергий (3.6.31)

$$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$$

Волновая функция основного состояния находится из уравнения (3.6.47)

$$\hat{a}\psi_0 = \frac{\hat{p} - im\omega x}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\psi_0 = 0$$

Или это уравнение имеет вид:

$$-i\hbar \frac{d}{dx} \psi_0 - im\omega x \psi_0 = 0 \quad (3.6.50)$$

Решением этого уравнения является волновая функция основного состояния, определенная с точностью до нормировочной постоянной  $C_0$ :

$$\psi_0 = C_0 \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) \quad (3.6.51)$$

Волновые функции следующих по энергии состояний определяются действием операторов рождения на волновую функцию основного состояния.

### 3.7. Движение в центральном поле

#### 3.7.1. Уравнение Шредингера в центральном поле.

*Центральное* (или *центрально-симметричное*) поле является полем, потенциальная энергия которого зависит только от модуля разности координат взаимодействующих частиц. Движение в центральном поле было уже рассмотрено в классической механике. Это очень важная задача в физике, поскольку проблема системы двух взаимодействующих тел сводится к решению задачи о движении одной частицы в поле центральных сил. В микромире в качестве примера таких задач можно привести задачи об атоме водорода, одноэлектронных ионах  $\text{He}^+$ ,  $\text{Li}^{+2}$ ,..., о позитронии (система, состоящая из электрона и позитрона) и ряда других объектов.

Итак, рассматриваем потенциальную энергию (в квантовой механике обычно ее называют *потенциалом*) системы двух тел:  $U(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|)$ . Потенциал зависит от относительного расстояния двух взаимодействующих тел. Обычно в такой задаче переходят в систему отсчета, связанную с центром масс двух частиц и разделяют поступательное движение центра масс системы из двух частиц и их относительное движение. Относительное движение – это задача о движении одной частицы приведенной массы в поле центральных сил (см [1], Глава 1, §1.14).

Если масса одного тела значительно больше массы другого  $M \gg m_0$ , то можно считать, что центр масс находится в центре массивной частицы и рассматривать движение одной частицы массы  $m_0$  в поле  $U(r)$ , где  $r$  – ее расстояние от второй, более массивной частицы.

Рассматривается стационарное уравнение Шредингера:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_0} \hat{\nabla}^2 + U(r) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (3.7.1)$$

В сферической системе координат оператор Лапласа имеет вид:

$$\hat{\nabla}^2 \equiv \Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \hat{\Lambda} \equiv \hat{\nabla}_r^2 + \frac{1}{r^2} \hat{\Lambda}, \quad (3.7.2)$$

где угловая часть оператора Лапласа, называемая иногда оператором Лежандра, имеет вид:

$$\hat{\Lambda} = \frac{\partial}{\sin \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (3.7.3)$$

Отметим важное обстоятельство: **оператор Лежандра  $\hat{\Lambda}$  не зависит от радиуса  $r$  и конкретного вида потенциала  $U(r)$** . Это позволяет разделить уравнение Шредингера на две части: одна зависит только от радиуса  $r$ , другая

– от угловых переменных  $\theta$  и  $\varphi$ . Убедимся в этом, если представим волновую функцию в виде произведения двух функций:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi). \quad (3.7.4)$$

Такой вид волновой функции приводит к разделению переменных в уравнении Шредингера. Представим (3.7.1) в более удобном виде:

$$\left( \hat{\nabla}_r^2 + \frac{1}{r^2} \hat{\Lambda} \right) \psi + k^2(r) \psi = 0, \quad (3.7.5)$$

где величина  $k^2$  (квадрат волнового числа в рамках классической механики)

$$k^2(r) = \frac{2m_0}{\hbar^2} (E - U(r)) \quad (3.7.6)$$

зависит только от радиуса  $r$ .

Умножим последнее уравнение Шредингера (3.7.5) на множитель  $r^2/\psi = r^2/(R \cdot Y)$  и, сокращая соответствующие части волновой функции, получаем уравнение в следующем виде:

$$\frac{r^2}{R(r)} \hat{\nabla}_r^2 R(r) + r^2 k^2(r) = - \frac{1}{Y(\theta, \varphi)} \hat{\Lambda} Y(\theta, \varphi) \quad (3.7.7)$$

зависит только от  $r$

зависит только от  $\theta, \varphi$

Поскольку левая и правая части в уравнении (3.7.7) зависят от разных переменных (каждая часть только от своей переменной), то левая и правая части отдельно равны постоянной – *постоянной разделения*  $\lambda$ .

$$\frac{r^2}{R(r)} \hat{\nabla}_r^2 R(r) + r^2 k^2(r) = \lambda = - \frac{1}{Y(\theta, \varphi)} \hat{\Lambda} Y(\theta, \varphi)$$

Таким образом получаем 2 уравнения, которые рассмотрим отдельно.

### 3.7.2. Уравнение для радиальной части.

Рассмотрим уравнение для радиальной части, которое приобретает вид:

$$\hat{\nabla}_r^2 R + k^2(r) R = \frac{\lambda}{r^2} R$$

Или, подставляя  $\hat{\nabla}_r^2$  из (3.7.2) и  $k^2$  из (3.7.6), получаем более подробную запись уравнения

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) R(r) + \left[ \frac{2m_0}{\hbar^2} (E - U(r)) - \frac{\lambda}{r^2} \right] R(r) = 0 \quad (3.7.8)$$

Производя дифференцирование, получаем следующее уравнение для радиальной части волновой функции:

$$R'' + \frac{2}{r}R' + \left(k^2 - \frac{\lambda}{r^2}\right)R = 0 \quad (3.7.9)$$

Уравнение для радиальной части волновой функции зависит от потенциала  $U(r)$ . Поэтому чтобы решать это уравнение необходимо знать конкретный вид центрального потенциала.

В радиальном уравнении (3.7.9) обычно делается следующая замена:

$$R(r) = \frac{1}{r}\chi(r), \quad (3.7.10)$$

Новая функция  $\chi(r)$  вводится для того, чтобы избавиться от первой производной в уравнении (3.7.9) для определения радиальной части. Вычисляя производные и подставляя их в (3.7.9), получаем уравнение для радиальной функции  $\chi(r)$ :

$$R' = \frac{\chi'}{r} - \frac{\chi}{r^2}, \quad R'' = \frac{\chi''}{r} - \frac{2\chi'}{r^2} + \frac{2\chi}{r^3}$$

$$\chi'' + \left(k^2 - \frac{\lambda}{r^2}\right)\chi = 0 \quad (3.7.11)$$

Решение этого уравнения для атома водорода рассмотрим ниже.

### 3.7.3. Уравнение для угловой части.

Уравнение для определения угловой части волновой функции также получается из (3.7.7):

$$-\frac{1}{Y(\theta, \varphi)}\hat{L}Y(\theta, \varphi) = \lambda$$

$$\hat{L}Y(\theta, \varphi) + \lambda Y(\theta, \varphi) = 0 \quad (3.7.12)$$

Записывая явный вид оператора Лежандра (3.7.3), имеем:

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) Y(\theta, \varphi) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} Y(\theta, \varphi) + \lambda Y(\theta, \varphi) = 0 \quad (3.7.13)$$

$$Y''_{\theta} + \operatorname{ctg}\theta Y'_{\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} Y''_{\varphi} + \lambda Y = 0 \quad (3.7.14)$$

Получили уравнение для угловой части волновой функции  $Y(\theta, \varphi)$  частицы в центрально-симметричном поле.

*Уравнение для угловой части волновой функции не зависит от конкретного вида потенциала  $U(r)$  и для всех центральных полей имеет одно и то же решение.* Поэтому имеет смысл рассмотреть его решение в общем виде.

### 3.8. Момент импульса в квантовой механике

#### 3.8.1. Оператор момента импульса.

В классической механике момент импульса материальной точки относительно начала отсчета определяется:

$$\vec{L} = [\vec{r}, \vec{p}] = m_0 [\vec{r}, \vec{v}] \quad (3.8.1)$$

где  $\vec{r}$  – радиус-вектор частицы, а  $\vec{p}$  и  $m_0$  – ее импульс и масса. Аналогично этому определению вводится оператор момента импульса в квантовой механике (отметим, ранее в §3.1 был введен оператор импульса:  $\hat{p} = -i\hbar\nabla$ ):

$$\hat{L} = [\hat{r}, \hat{p}] = -i\hbar [\hat{r}, \hat{\nabla}] \quad (3.8.2)$$

Оператор момента импульса – векторный оператор, поэтому его можно представить, как сумму операторов проекций:

$$\hat{L} = \hat{L}_x \vec{e}_x + \hat{L}_y \vec{e}_y + \hat{L}_z \vec{e}_z, \quad (3.8.3)$$

где операторы проекций момента импульса определяются:

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= -i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ \hat{L}_y &= -i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ \hat{L}_z &= -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \end{aligned} \quad (3.8.4)$$

Легко получить коммутатор для двух различных проекций момента импульса:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= -\hbar^2 \left\{ \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) - \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \right\} = \\ &= -\hbar^2 \left( y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) = i\hbar \left[ -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] = i\hbar \hat{L}_z \end{aligned} \quad (3.8.5)$$

В итоге для всех проекций момента импульса получаем следующие коммутаторы:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z, \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y \quad (3.8.6)$$

Коммутаторы операторов проекций отличны от нуля, т.е. любые 2 проекции момента импульса не могут иметь одновременно точные значения.

Поскольку следует важный вывод: *Две любые проекции момента импульса не могут одновременно иметь определенные значения.* Следовательно, и сам *вектор момента импульса  $\vec{L}$  не имеет определенного направления в пространстве.*

В **классической механике** при движении частицы в центральном поле помимо энергии сохраняется вектор момента импульса, то есть сохраняются его величина (длина вектора) и направление в пространстве (иначе, все проекции вектора). Закон сохранения момента импульса приводит к плоской траектории движения частицы [1].

В **квантовой механике** при движении частицы в центральном поле получаем, что векторная величина момента импульса не может иметь определенного значения. Однако оказывается, как будет рассмотрено в следующем параграфе, *определенные значения могут иметь одновременно абсолютная величина момента импульса (квадрат момента импульса сохраняется) и одна из трех его проекций*.

### 3.8.2. Оператор проекции момента импульса.

Поскольку нас будет интересовать приложение теории момента импульса (МИ) к движению частицы в центральном поле, то удобнее представлять оператор МИ в сферической системе координат  $(r, \theta, \varphi)$ :

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta \quad (3.8.7)$$

Рассмотрим для начала только одну координату – угол  $\varphi$ , определяющую угловое положение (вращение) вокруг оси  $z$ . Пусть  $\varphi$  меняется и рассмотрим производную от функции  $\psi$  по координате  $\varphi$ :

$$\frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \varphi} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \varphi} + \frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \varphi} = \frac{\partial \psi}{\partial x} (-r \sin \theta \sin \varphi) + \frac{\partial \psi}{\partial y} r \sin \theta \cos \varphi + \frac{\partial \psi}{\partial z} \cdot 0 = \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi$$

Тогда умножая последнее равенство на множитель “ $-i\hbar$ ”, получаем оператор проекции момента импульса а ось  $z$ :

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} = -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = \hat{L}_z \quad (3.8.8)$$

Итак, в сферической системе координат оператор проекции МИ на ось  $z$  определяется соотношением:

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (3.8.9)$$

В принципе ось  $z$  – произвольная, т.к. в центральном поле нет выделенного направления, если нет каких-либо внешних условий или ограничений.

Решим уравнение на *собственные значения и собственные функции оператора проекции момента импульса*:

$$\begin{aligned} \hat{L}_z \psi &= L_z \psi \\ -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} &= L_z \psi \end{aligned} \quad (3.8.10)$$



Или далее имеем:

$$\frac{\partial \psi}{\psi} = \frac{i}{\hbar} L_z \partial \varphi$$

Решением уравнения (3.8.10) является осциллирующая экспонента:

$$\psi_m = A \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar} L_z \varphi\right) \quad (3.8.11)$$

Воспользуемся условием однозначности решения, которое означает, что функция должна остаться той же при повороте на целое число полных оборотов  $2\pi$ , в частности на полный оборот  $2\pi$ , т.е. записываем

$$\psi_m(\varphi) = \psi_m(\varphi + 2\pi) \quad (3.8.12)$$

Тогда подставляя (3.8.11), имеем следующее условие:

$$A e^{\frac{i}{\hbar} L_z \varphi} = A e^{\frac{i}{\hbar} L_z \varphi} e^{\frac{i}{\hbar} L_z 2\pi}$$

В силу однозначности решения получаем соотношение

$$e^{\frac{i}{\hbar} 2\pi L_z} = 1 \quad (3.8.13)$$

Откуда получаем условие на собственные значения  $L_z$

$$L_z = m\hbar, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (3.8.14)$$

Число  $m$  определяет собственные значения проекций момента импульса частицы  $L_z$  и называется *магнитным квантовым числом*.

Подставляя (3.8.14) в (3.8.11), записываем собственную функцию оператора проекции момента импульса

$$\psi_m(\varphi) = A e^{im\varphi} \quad (3.8.15)$$

Коэффициент  $A$  определяем из нормировки собственной функции:

$$\int_0^{2\pi} \psi_m^* \psi_m d\varphi = A^2 \int_0^{2\pi} e^{-im\varphi} e^{im\varphi} d\varphi = 2\pi A^2 = 1$$

Откуда получаем нормировочный множитель:

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \quad (3.8.16)$$

Легко видеть, что выполняется условие ортонормированности:

$$\int_0^{2\pi} \psi_{m'}^* \psi_m d\varphi = \delta_{m'm} \quad (3.8.17)$$

Окончательно получаем *собственные функции и собственные значения оператора проекции МИ*:

$$\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\varphi) \quad (3.8.18)$$

$$\hat{L}_z \psi_m = m\hbar \psi_m \quad (3.8.19)$$

Итак, проекция момента импульса на выделенное направление *квантована*, т.е. проекция МИ может принимать только значения кратные  $\hbar$ . Хотя направление оси  $z$  произвольно, но после выбора  $z$  – направления проекции  $L_z$  квантуются и принимают определенные дискретные значения, а другие проекции момента импульса остаются *неопределенными*.

### 3.9. Оператор квадрата момента импульса. Сферические функции.

#### 3.9.1. Оператор квадрата момента импульса (МИ).

Оператор квадрата МИ определяется, как и обычный квадрат МИ через проекции:

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \quad (3.9.1)$$

Для анализа поведения частицы в центрально-симметричном поле, нам нужно записать оператор в сферической системе координат. Искать это выражение удобно, если представить оператор квадрата МИ в следующем виде:

$$\hat{L}^2 = \frac{1}{2} (\hat{L}_x + i\hat{L}_y)(\hat{L}_x - i\hat{L}_y) + \frac{1}{2} (\hat{L}_x - i\hat{L}_y)(\hat{L}_x + i\hat{L}_y) + \hat{L}_z^2 \quad (3.9.2)$$

Здесь мы введем операторы “рождения” и “уничтожения” (их смысл будет виден ниже в пункте 3.9.2):

$$\hat{L}_+ \equiv (\hat{L}_x + i\hat{L}_y) \quad (3.9.3)$$

$$\hat{L}_- \equiv (\hat{L}_x - i\hat{L}_y) \quad (3.9.4)$$

Воспользовавшись коммутационным соотношением

$$[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = \hat{L}_+ \hat{L}_- - \hat{L}_- \hat{L}_+ = 2\hbar \hat{L}_z, \quad (3.9.5)$$

представим оператор квадрата МИ в следующем виде

$$\hat{L}^2 = (\hat{L}_x - i\hat{L}_y)(\hat{L}_x + i\hat{L}_y) + \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z = \hat{L}_- \hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z. \quad (3.9.6)$$

Для того чтобы определить  $\hat{L}^2$  через угловые переменные  $\theta, \varphi$ , сделаем некоторые заготовки для производных по этим переменным:

$$\frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi \quad (3.9.7)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial \theta} = \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \theta} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \theta} + \frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \theta} = \left( x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi \cdot \text{ctg} \theta - z \frac{\partial \psi}{\partial z} \text{tg} \theta \quad (3.9.8)$$

Итак, чтобы определить оператор квадрата МИ  $\hat{L}^2$ , ищем сначала выражение для оператора “рождения”. Напомним, что декартовы координаты записываются через сферические координаты в следующем виде:

$$\begin{cases} z = r \text{Cos} \theta \\ x + iy = r \text{Sin} \theta \text{Cos} \varphi + ir \text{Sin} \theta \text{Sin} \varphi = r \text{Sin} \theta \cdot e^{i\varphi} \end{cases} \quad (3.9.9)$$

Далее проводим вычисления:

$$\left( \hat{L}_x + i \hat{L}_y \right) \psi = -i \hbar \left[ \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) + i \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \right] \psi = \hbar \left[ iz \frac{\partial}{\partial y} + z \frac{\partial}{\partial x} - (x + iy) \frac{\partial}{\partial z} \right] \psi = *$$

Для дальнейшего вывода воспользуемся сначала (3.9.9) и затем следующим соотношением

$$r e^{-i\varphi} \text{Cos} \theta = \frac{r \text{Cos} \theta \text{Sin} \theta}{\text{Sin} \theta} (\text{Cos} \varphi - i \text{Sin} \varphi) = (x - iy) \text{ctg} \theta:$$

$$\begin{aligned} * &= \hbar \left[ r \text{Cos} \theta \left( \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) - r \text{Sin} \theta \cdot e^{i\varphi} \frac{\partial}{\partial z} \right] \psi = \hbar \cdot e^{i\varphi} \left[ r \text{Cos} \theta \cdot e^{-i\varphi} \left( \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) - r \text{Sin} \theta \frac{\partial}{\partial z} \right] \psi = \\ &= \hbar \cdot e^{i\varphi} \left[ (x - iy) \text{ctg} \theta \left( \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) - r \text{Sin} \theta \frac{\text{Cos} \theta}{\text{Cos} \theta} \frac{\partial}{\partial z} \right] \psi = \\ &= \hbar \cdot e^{i\varphi} \left[ \left( x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} \right) \text{ctg} \theta - \text{tg} \theta \cdot z \frac{\partial}{\partial z} + i \text{ctg} \theta \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] \psi \end{aligned}$$

Теперь воспользуемся (3.9.7) и (3.9.8) и окончательно получаем для оператора “рождения” выражение в сферической системе координат:

$$\hat{L}_+ \psi = \left( \hat{L}_x + i \hat{L}_y \right) \psi = \hbar e^{i\varphi} \left( \frac{\partial \psi}{\partial \theta} + i \text{ctg} \theta \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right) \quad (3.9.10)$$

Аналогично можно получить выражение для оператора “уничтожения”:

$$\hat{L}_- \psi = \left( \hat{L}_x - i \hat{L}_y \right) \psi = -\hbar e^{-i\varphi} \left( \frac{\partial \psi}{\partial \theta} - i \text{ctg} \theta \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right). \quad (3.9.11)$$

Следующий шаг – получим произведение операторов “рождения” и “уничтожения”, которое входит в оператор квадрата момента импульса (3.9.6):

$$\begin{aligned} \hat{L}_- \hat{L}_+ &= \left( \hat{L}_x - i \hat{L}_y \right) \left( \hat{L}_x + i \hat{L}_y \right) = -\hbar^2 \cdot e^{-i\varphi} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} - i \text{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) e^{i\varphi} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} + i \text{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) = \\ &= -\hbar^2 \left[ \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \text{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \text{ctg}^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + i \left( \text{ctg}^2 \theta - \frac{1}{\text{Sin}^2 \theta} \right) \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \end{aligned}$$

Итак, получаем для произведения операторов выражение через сферические координаты:

$$(\hat{L}_x - i\hat{L}_y)(\hat{L}_x + i\hat{L}_y) = -\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg}^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - i \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (3.9.12)$$

Вспомним также полученный в §3.8 оператор проекции МИ:

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad \hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (3.9.13)$$

Подставим (3.9.12) и (3.9.13) в оператор квадрата МИ (3.9.6). Итак, получаем окончательный вид *оператора квадрата момента импульса в сферической системе координат*:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg}^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) = -\hbar^2 \left( \frac{1}{\operatorname{Sin} \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \operatorname{Sin} \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\operatorname{Sin}^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \quad (3.9.14)$$

Легко видеть, что выражение в скобках (3.9.14) **совпадает с выражением для оператора Лежандра (3.7.3), т.е. угловой частью оператора  $\Delta$ .**

### 3.9.2. Собственные значения оператора квадрата МИ

Вспоминая выражение для оператора Лежандра  $\hat{\Lambda}$  (3.7.13), видим, что оператор квадрата МИ (3.9.14) пропорционален ему:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \hat{\Lambda} \quad (3.9.15)$$

Таким образом, решение уравнения на собственные значения оператора Лежандра (3.7.12):

$$\hat{\Lambda} Y(\theta, \varphi) = -\lambda Y(\theta, \varphi) \quad (3.9.16)$$

определяет также *собственные функции* и *собственные значения оператора квадрата МИ*. С другой стороны, уравнение (3.9.16) есть уравнение для определения угловой части волновой функции при движении в центральном поле.

Легко увидеть, что оператор квадрата МИ коммутирует с оператором любой проекции МИ:

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = [\hat{L}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}^2, \hat{L}_y] = 0 \quad (3.9.17)$$

Таким образом, наряду с квадратом МИ может быть определена и любая проекция (но только одна! поскольку операторы проекций МИ не коммутируют между собой).

Обычно в качестве выделенной выбирают проекцию момента импульса на ось  $z - L_z$ . Поскольку коммутатор  $[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$ , то у этих операторов могут быть

*общие собственные функции.* Отличие собственных функций этих операторов состоит только в том, что собственная функция оператора  $\hat{L}^2$  умножается на функцию от угла  $\theta - f(\theta)$ :

$$\begin{aligned}\hat{L}^2 Y(\theta, \varphi) &= L^2 Y(\theta, \varphi) \\ \hat{L}^2 f(\theta) \cdot e^{im\varphi} &= L^2 f(\theta) \cdot e^{im\varphi}\end{aligned}\quad (3.9.18)$$

В рамках этого курса мы не будем решать уравнения (3.9.16) или (3.9.18), однако сможем получить собственные значения оператора квадрата МИ, не решая эти уравнения.

Для этого для начала определим смысл введенных выше операторов “рождения” и “уничтожения” (3.9.3) и (3.9.4). Подействуем оператором рождения  $\hat{L}_+$  на собственную функцию операторов  $\hat{L}^2$  и  $\hat{L}_z - Y_m(\theta, \varphi) = f(\theta) \cdot \exp(im\varphi)$ , а затем оператором  $\hat{L}_z$ , чтобы узнать, какова проекция МИ после действия оператора рождения:

$$\hat{L}_z \hat{L}_+ Y_m(\theta, \varphi) = \hat{L}_z (\hat{L}_x + i\hat{L}_y) Y_m(\theta, \varphi) = *$$

Пронесем оператор проекции МИ через оператор рождения, вспомнив коммутационные соотношения (3.8.6) из предыдущего параграфа:

$$* = (i\hbar\hat{L}_y + \hat{L}_x\hat{L}_z + i\hat{L}_y\hat{L}_z + \hbar\hat{L}_x) Y_m = \hat{L}_+ (m\hbar Y_m + \hbar Y_m) = \hbar(m+1)\hat{L}_+ Y_m$$

Таким образом, видно из полученных выражений, что функция, образованная после действия оператора “рождения” (“уничтожения”) ( $\hat{L}_+ Y_m$ ), есть собственная функция оператора  $L_z$  с собственным значением  $\hbar(m \pm 1)$ . Итак, делаем следующий вывод: оператор “рождения”  $\hat{L}_+$  увеличивает проекцию МИ на величину  $\hbar$ , а оператор  $\hat{L}_-$  уменьшает проекцию МИ на  $\hbar$ :

$$\begin{cases} \hat{L}_+ Y_m = Y_{m+1} \\ \hat{L}_- Y_m = Y_{m-1} \end{cases}\quad (3.9.19)$$

Далее рассуждаем следующим образом. Собственное значение  $\hat{L}^2$  дает квадрат длины вектора МИ, а  $L_z$  есть проекция МИ, равная  $m\hbar$ . Очевидно, что проекция вектора не может быть больше длины вектора. Пусть *максимальное значение проекции* равно:  $|m| = l$ , т.е.:

$$\hat{L}_z Y_m(\theta, \varphi) = \hbar m Y_m(\theta, \varphi) = \hbar l Y_m(\theta, \varphi) = \hbar l Y_l(\theta, \varphi)\quad (3.9.20)$$

Если  $l$  максимальная проекция, то тогда действие оператора рождения не может увеличить эту проекцию и его действие на такую волновую функцию должно быть равно нулю:

$$\hat{L}_+ Y_l = 0\quad (3.9.21)$$

Очевидно также, что

$$\hat{L}_- \hat{L}_+ Y_l = 0.$$

Тогда воспользуемся выражением для оператора МИ (3.9.6) и подействуем им на волновую функцию с максимальной проекцией МИ. С одной стороны, из (3.9.18) имеем:

$$\hat{L}^2 Y_l = L^2 Y_l$$

С другой стороны, исходя из (3.9.21) и действия операторов проекции, имеем:

$$\hat{L}^2 Y_l = (\hat{L}_- \hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z) Y_l = (0 + \hbar^2 l^2 + \hbar^2 l) Y_l = \hbar^2 l(l+1) Y_l$$

Откуда получаем, что *собственные значения оператора квадрата МИ* равны:

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1), \quad (3.9.22)$$

где  $l$  – максимальная проекция МИ на ось  $z$  в единицах  $\hbar$  и принимает значения

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Итак, собственные значения операторов  $\hat{L}^2$  и  $\hat{L}_z$ :

$$\begin{cases} \hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ \hat{L}_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{lm}(\theta, \varphi) \end{cases} \quad (3.9.23)$$

Здесь волновые функции  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  имеют два индекса: максимальная проекция МИ  $l$  и его текущая проекция  $m$ . Квантовое число  $l$  носит название *орбитального квантового числа* и принимает значения:

$$\begin{aligned} l &= 0, 1, 2, 3, 4, \dots \\ \text{или } s, p, d, f, \dots \end{aligned} \quad (3.9.24)$$

Снизу от чисел приведены часто встречающиеся буквенные обозначения этого квантового числа. Квантовое число  $m$  называется *магнитным квантовым числом*, и оно принимает все значения через единицу до максимального значения:

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm l \quad (3.9.25)$$

Напомним, что это квантовое число  $m$  определяет проекцию МИ на ось  $z$ .

### 3.9.3. О собственных функциях оператора квадрата МИ

Собственными функциями оператора квадрата МИ являются *сферические* или *шаровые* функции  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ . Они являются собственными функциями следующих операторов:  $\hat{L}$ ,  $\hat{L}^2$  и  $\hat{L}_z$  с соответствующими собственными значениями:

$$\hat{L} Y_{lm}(\theta, \varphi) = -l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (3.9.26)$$

$$\hat{L}_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

Шаровые функции определяют *плотность вероятности нахождения частицы* под определенными углами  $\theta, \varphi$ . Ранее (см § 3.8) мы получали собственные функции оператора проекции МИ отдельно (3.8.16), поэтому шаровые функции можно представить в виде:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \Theta_{lm}(\theta), \quad (3.9.27)$$

где выделены функции, зависящие только от угла  $\theta$ :

$$\Theta_{lm}(\theta) = \frac{(-1)^{l+m}}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}} (\sin \theta)^m \frac{d^{l+m}(\sin \theta)^{2l}}{(d \cos \theta)^{l+m}} \quad (3.9.28)$$

Можно убедиться, что так выбранные шаровые функции  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  удовлетворяют условию ортонормированности:

$$\int Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) d\Omega = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (3.9.29)$$

**Примечание 1.** Функции  $\Theta_{lm}(\theta)$  связаны с присоединенными полиномами Лежандра:

$$\Theta_{lm}(\theta) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta)$$

Присоединенные полиномы Лежандра могут быть определены по следующей рекуррентной формуле:

$$P_l^m(x) = \frac{\sin^m \theta}{2^l l!} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2 - 1)^l,$$

где  $x = \cos \theta$ . Присоединенные полиномы Лежандра удовлетворяют уравнению:

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) P_l^m(\cos \theta) + l(l+1) P_l^m(\cos \theta) - \frac{m^2 P_l^m(\cos \theta)}{\sin^2 \theta} = 0$$

### 3.9.4. Описание состояний в центрально симметричном поле.

Итак, для описания движения частицы массы  $m_0$  в центрально симметричном поле имеем следующий гамильтониан

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta + U(r) \quad (3.9.30)$$

Стационарное уравнение Шредингера и соответствующая волновая функция, как мы определили в §3.7, имеют вид:

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

$$\psi(\vec{r}) = R(r)Y(\theta, \varphi) = R(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (3.9.31)$$

Поскольку оператор Лапласа в (3.9.30) представляется в виде:

$$\Delta = \Delta_r + \frac{1}{r^2} \hat{\Lambda},$$

мы имеем 2 разделившихся уравнения – для радиальной и угловой частей волновой функции:

$$\begin{cases} \Delta_r R(r) + \left( k^2 - \frac{\lambda}{r^2} \right) R(r) = 0, \\ \hat{\Lambda} Y(\theta, \varphi) + \lambda Y(\theta, \varphi) = 0 \end{cases}, \quad (3.9.32)$$

где

$$k^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2} (E - U(r)), \quad \lambda = l(l+1), \quad Y(\theta, \varphi) = Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Определение  $k^2$  в задаче равносильно определению энергии частицы, т.е. нахождению собственных значений энергии  $E$ . Поле  $U(r)$  – стационарное, т.е. энергия частицы сохраняется.

Что еще сохраняется при движении частицы в центральном поле? По классической механике – сохраняются полная энергия и момент импульса частицы как векторная величина.

В квантовой механике формулируется следующее утверждение: *для того, чтобы динамическая переменная сохранялась во времени* (т.е. была бы интегралом движения), *необходимо и достаточно, чтобы соответствующий оператор не зависел явно от времени и коммутировал с оператором полной энергии.*

В самом деле, рассмотрим производную по времени от среднего значения какого-либо оператора:

$$\frac{d}{dt} \int \psi^* \hat{Q} \psi dV = \int \left[ \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{Q} \psi + \psi^* \hat{Q} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi^* \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \psi \right] dV \quad (3.9.33)$$

Из стационарного уравнения Шредингера выражаем первые производные по времени:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \psi, \quad \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \hat{H}^* \psi^*$$

и подставим в выражение (3.9.33), используя свойство эрмитовости оператора  $\hat{H}$ :

$$\int (\hat{H}^* \psi^*) \psi dV = \int \psi^* \hat{H} \psi dV.$$



Продолжаем запись (3.9.33):

$$\frac{d}{dt} \int \psi^* \hat{Q} \psi dV = \int \left[ \frac{i}{\hbar} \hat{H}^* \psi^* \hat{Q} \psi - \frac{i}{\hbar} \psi^* \hat{Q} \hat{H} \psi + \psi^* \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \psi \right] dV = \int \psi^* \left[ \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{Q}] \right] \psi dV$$

Итак, если полная производная по времени равна 0 (интеграл есть сохраняющаяся величина), то получаем следующее соотношение:

$$\frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{Q}] = 0 \quad (3.9.34)$$

что и требовалось доказать.

Например, рассмотрим импульс. Оператор импульса  $\hat{p} = -i\hbar\nabla$  от времени явно не зависит. Однако коммутатор не равен нулю в общем случае  $[\hat{p}, \hat{H}] \neq 0$  из-за зависимости потенциальной энергии от координат. Таким образом, *импульс не сохраняется при движении* частицы в центрально-симметричном поле, как и в классической механике.

Легко также увидеть, что в центральном поле коммутаторы оператора квадрата момента импульса  $\hat{L}^2$  и проекции момента импульса  $\hat{L}_z$  с оператором полной энергии  $\hat{H}$  равны нулю, поскольку потенциальная энергия зависит только от модуля  $\vec{r}$ :

$$[\hat{L}^2, \hat{H}] = 0 \quad \text{и} \quad [\hat{L}_z, \hat{H}] = 0 \quad (3.9.35)$$

Кроме того, эти операторы явно не зависят от времени. Таким образом, определенные ранее величины  $L^2$  и  $L_z$  сохраняются при квантовомеханическом описании движения частицы в центральном поле: *момент импульса по абсолютной величине (длина вектора МИ) и его проекция имеют определенные значения и сохраняются во времени.*

Соответствующим собственным значениям энергии  $E$ , квадрата момента импульса  $L^2$ , его проекции  $L_z$  сопоставляются *квантовые числа*, описывающие состояние частиц в центральном поле, соответственно:  $n$ ,  $l$ ,  $m$ . Энергия, в общем, определяется радиальным движением и соответственно главным квантовым числом  $n$ , хотя она может также зависеть и от других квантовых чисел  $l$ ,  $m$ .

Однако движение, описываемое угловыми переменными, определяются квантовыми числами  $l$ ,  $m$ . Оно *является общим для всех центрально-симметричных полей*. Ниже разберем классификацию состояний по этому движению.

Рассмотрим несколько состояний с наименьшими значениями орбитального квантового числа  $l$ .

1). Состояние с квантовыми числами  $l = 0, m = 0$ . Это так называемое  $S$  – состояние. Это состояние обладает сферической симметрией. Момент импульса и соответственно его проекция равны нулю. Состояние описывается шаровой (волновой) функцией вида

$$Y_{00}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}},$$

которая вообще не зависит от углов. Поэтому распределение плотности симметрично относительно центра (см рис. 9.1).

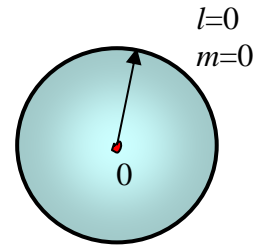


Рис. 9.1.

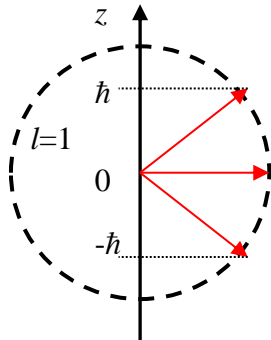


Рис. 9.2.

2). Состояние с квантовыми числами  $l = 1, m = 0, \pm 1$ . Это  $P$  – состояние. Полный момент импульса частицы в таком состоянии равен  $L = \hbar\sqrt{l(l+1)} = \hbar\sqrt{2}$ . Три возможных состояния частицы отличаются магнитными квантовыми числами  $m$  – проекциями момента импульса на ось  $z$ , которые схематично изображены на рис. 9.2. Рассмотрим эти состояния подробнее.

а). Состояние с магнитным квантовым числом  $m = 0$ , угловая часть волновой функции этого состояния описывается шаровой функцией

$$Y_{10} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos\theta.$$

Проекция МИ на ось  $z$  равна 0. Поскольку зависимости шаровой функции от угла  $\varphi$  нет, то распределение плотности симметрично относительно оси  $z$  и имеет вид “гантели”, ориентированной по оси  $z$  (см рис. 9.3).

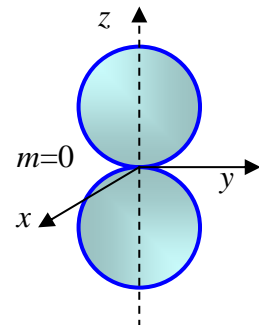


Рис. 9.3.

б). Для состояния с магнитным квантовым числом  $m = \pm 1$  соответствующая шаровая функция равна

$$Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta \cdot e^{\pm i\varphi}.$$

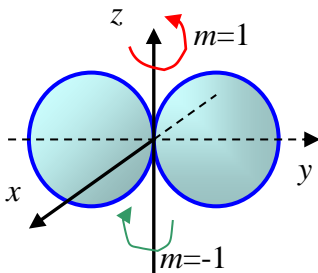


Рис. 9.4.

Эти состояния с проекцией МИ на ось  $z$  равной  $\pm\hbar$ . Распределение плотности имеет вид бублика, нанизанного на ось  $z$  (на рисунке 9.4 даны разрезы распределения плотности в плоскости  $(zy)$ ). Причем бублик может “закручиваться” в разные стороны, причем направления “закручивания” вокруг оси  $z$  соответствуют различным знакам проекции МИ.

3). Состояние с квантовыми числами  $l = 2$ ,  $m = 0, \pm 1, \pm 2$ . Имеем  $D$  – состояние. Полный момент импульса частицы равен  $L = \hbar\sqrt{l(l+1)} = \hbar\sqrt{6}$ . Пять возможных состояний отличаются проекциями момента импульса  $m$  на ось  $z$  (см рис. 9.5). Запишем соответствующие угловые части волновых функций.

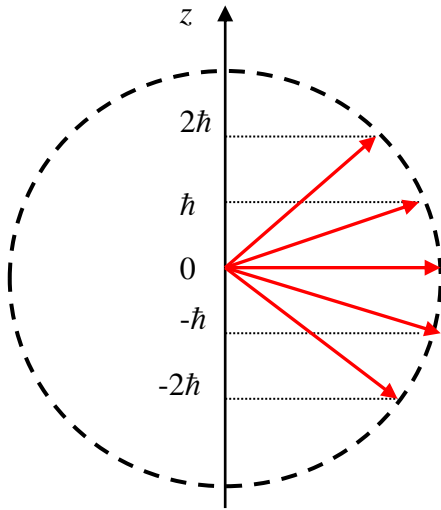


Рис. 9.5.

а). Состояние с магнитным квантовым числом  $m = 0$ . Проекция МИ равна нулю. Состояние описывается шаровой (волновой) функцией вида

$$Y_{20}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos^2\theta - 1).$$

Шаровая функция, описывающая состояние с нулевой проекцией момента импульса, от угла  $\varphi$  не зависит, поэтому распределение плотности симметрично относительно оси  $z$ . Распределение плотности вероятности изображается “гантелями с манжеткой” вокруг оси  $z$  (см рис. 9.6 А).

б). Состояние с магнитным квантовым числом  $m = \pm 1$ . Проекция момента импульса  $L_z$  равна постоянной Планка  $L_z = \pm \hbar$ . Состояние описывается шаровой (волновой) функцией вида

$$Y_{2,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos\theta \sin\theta e^{\pm i\varphi}.$$

Разрез распределения плотности вероятности, симметричный относительно оси  $z$ , в плоскости  $(zy)$  изображен на рисунке 9.6 Б.

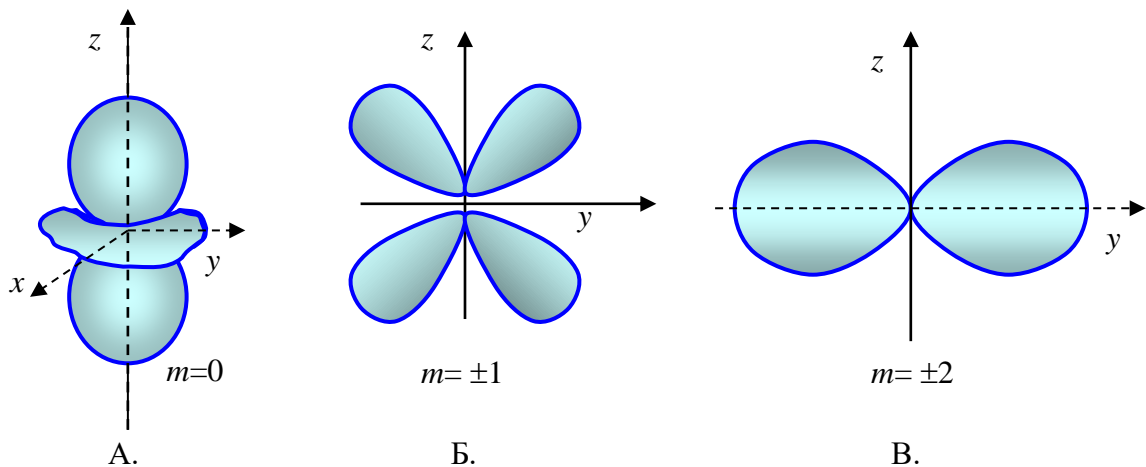


Рис. 9.6.

в). Состояние с магнитным квантовым числом  $m = \pm 2$ . Проекция МИ равна двум (в единицах  $\hbar$ ). Состояние описывается шаровой (волновой) функцией вида

$$Y_{2,\pm 2}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta \cdot e^{\pm 2i\varphi}$$

Разрез распределения плотности вероятности в плоскости ( $zy$ ), имеющей тор-образный вид относительно оси  $z$ , изображен на рисунке 9.6 В.

Аналогично рассматриваются шаровые функции и плотности вероятности распределения частиц по угловым переменным при больших значениях орбитального числа  $l$ .