

ЛЕКЦИЯ 4

§ 14. Прямоугольная потенциальная яма (стационарные состояния)

Рассмотрим одномерное движение частицы с массой μ в поле с потенциальной энергией (рис. 3):

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x < -a/2, & \text{(I)} \\ -V_0 < 0 & \text{при } -a/2 \leq x \leq a/2, & \text{(II)} \\ 0 & \text{при } x > a/2. & \text{(III)} \end{cases}$$

Здесь за начало отсчета энергии принято значение потенциальной энергии на бесконечности. Такое поле принято называть прямоугольной потенциальной ямой. Одномерная прямоугольная потенциальная яма часто используется в качестве первого приближения для описания движения частицы в реальных полях с большим градиентом в отдельных малых областях пространства. Примером такой ситуации может служить движение электрона в металлической пластинке, поскольку внутри металла движение в первом приближении может считаться свободным, а на поверхности металла за счет конечной работы выхода электрона имеется скачок потенциала.

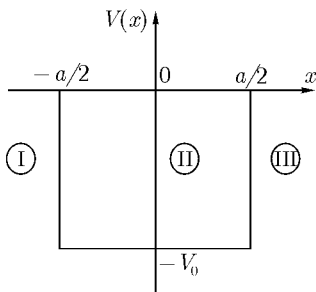


Рис. 3. Одномерная прямоугольная потенциальная яма

Хорошо видно, что общий характер движения классической частицы в прямоугольной яме существенно отличается от характера движения классического гармонического осциллятора. Движение классического осциллятора всегда финитно, поскольку при любой полной энергии E конечны размеры той области, где E больше потенциальной энергии. В то же время характер движения классической частицы в прямоугольной потенциальной яме (рис. 3) существенно зависит от величины полной энергии: при $E < 0$ движение финитно, а при $E \geq 0$ инфинитно. Говорят, что при $E < 0$ частица находится в связанном состоянии с энергией связи $\varepsilon = -E$. Энергия связи представляет

собой ту минимальную энергию, которую надо передать частице для того, чтобы она перешла в состояние инфинитного движения.

Переходя к квантовой механике, сначала рассмотрим стационарное движение квантовой частицы в прямоугольной потенциальной яме, т. е. свойства стационарных состояний.

Итак, наша задача состоит в нахождении решений одномерного стационарного уравнения Шредингера, которые удовлетворяют требованиям квадратичной интегрируемости, непрерывности и непрерывности производной на всей вещественной оси.

Поскольку гамильтониан нашей задачи является четным, можно утверждать, что все стационарные состояния дискретного спектра обладают определенной четностью. Используем эту информацию для упрощения решения задачи.

Ищем решения в интервале энергии $-V_0 < E \leq 0$. В пространственной области (I) стационарное уравнение Шредингера принимает вид

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}E\psi(x) = 0. \quad (14.1)$$

Введем обозначение

$$\frac{2\mu}{\hbar^2}E \equiv -\kappa^2 \leq 0, \quad (14.2)$$

тогда

$$\kappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2\mu|E|} \geq 0.$$

Общее решение уравнения (14.1) есть

$$\psi_{(I)}(x) = Ae^{\kappa x} + De^{-\kappa x}.$$

Для обеспечения квадратичной интегрируемости этой функции во всей области (I) ($-\infty < x < -a/2$) следует положить $D = 0$, т. е.

$$\psi_{(I)}(x) = Ae^{\kappa x}. \quad (14.3)$$

Аналогично в области (III) получим

$$\psi_{(III)}(x) = Ce^{\kappa x}. \quad (14.4)$$

В области (II) уравнение Шредингера принимает вид

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0, \quad (14.5)$$

где

$$k^2 \equiv \frac{2\mu}{\hbar^2}(E + V_0) > 0, \quad (14.6)$$

т. е.

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2\mu(E + V_0)} > 0.$$

Общее решение уравнения (14.5) есть

$$\psi_{(\Pi)}(x) = B_1 \cos(kx) + B_2 \sin(kx). \quad (14.7)$$

Поскольку каждая собственная функция должна быть либо четной, либо нечетной, только одна из констант B_1 , B_2 может быть отлична от нуля в данном состоянии. Таким образом, все стационарные состояния нашего гамильтониана могут быть разбиты на два класса:

(А) состояния положительной четности, для которых $B_2 = 0$, $A = C$;

(В) состояния отрицательной четности, для которых $B_1 = 0$, $A = -C$.

Теперь мы должны наложить требования непрерывности функций и их производных в точках разрыва потенциальной энергии $x = \pm a/2$. Эти условия позволяют определить константы интегрирования.

Произведем «сшивание» для состояний класса (А).

В точке $x = -a/2$ получаем

$$Ae^{-\frac{1}{2}\varkappa a} = B_1 \cos \frac{ka}{2},$$

$$\varkappa Ae^{-\frac{1}{2}\varkappa a} = kB_1 \sin \frac{ka}{2}.$$

Отсюда имеем

$$A = B_1 e^{\frac{1}{2}\varkappa a} \cos \frac{ka}{2}, \quad (14.8)$$

$$B_1 \left(k \sin \frac{ka}{2} - \varkappa \cos \frac{ka}{2} \right) = 0. \quad (14.9)$$

Легко проверить, что сшивание в точке $x = a/2$ с учетом того, что $A = C$, приводит к этому же результату.

Мы видим, что система уравнений (14.8) и (14.9) имеет нетривиальные решения тогда и только тогда, когда k и \varkappa удовлетворяют уравнению

$$k \cdot \operatorname{tg}(ka/2) = \varkappa. \quad (14.10)$$

Для исследования уравнения (14.10) можно использовать графический метод, если заметить, что условие

$$k^2 + \varkappa^2 = K^2, \quad K \equiv \frac{1}{\hbar} \sqrt{2\mu V_0} > 0 \quad (14.11)$$

представляет собой уравнение окружности с центром в точке $(k = 0, \varkappa = 0)$ и с радиусом K . Поскольку нас интересует только одна четверть этой окружности ($k > 0, \varkappa \geq 0$), то уравнению (14.10) соответствует следующий график (рис. 4).

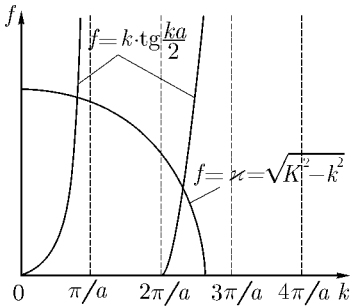


Рис. 4. Графический анализ уравнения $k \cdot \operatorname{tg}(ka/2) = \varkappa$

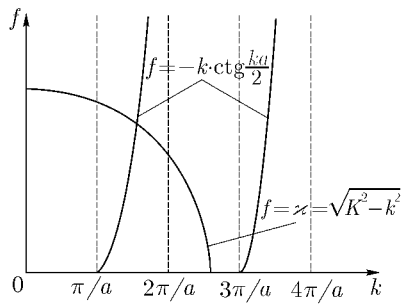


Рис. 5. Графический анализ уравнения $-k \cdot \operatorname{ctg}(ka/2) = \varkappa$

Мы видим, что уравнение (14.10) имеет хотя бы одно решение при любых значениях параметров потенциала V_0 и a .

Теперь рассмотрим состояния класса (B). Сшивание в точках $x = \mp a/2$ приводит к системе уравнений:

$$\begin{aligned} Ae^{-\frac{1}{2}\varkappa a} &= -B_2 \sin \frac{ka}{2}, \\ \varkappa Ae^{-\frac{1}{2}\varkappa a} &= kB_2 \cos \frac{ka}{2}, \end{aligned}$$

из которой получаем

$$\begin{aligned} B_2 \left(k \cos \frac{ka}{2} + \varkappa \sin \frac{ka}{2} \right) &= 0, \\ A = -C &= -\exp\left(\frac{\varkappa a}{2}\right) B_2 \sin \frac{ka}{2}. \end{aligned}$$

Нетривиальное решение этой системы существует тогда и только тогда, когда выполняется условие

$$-k \cdot \operatorname{ctg} \frac{ka}{2} = \varkappa. \quad (14.12)$$

Уравнению (14.12) соответствует график рис. 5. Видим, что уравнение (14.12) имеет решение только при $k \geq \pi/a$.

Итак, в каждом интервале $(n-1)\pi/a \leq k < n\pi/a$, где $n = 1, 2, \dots, N$, только одно из уравнений (14.10) и (14.12) может иметь корень, притом единственный. Следовательно, все корни можно пронумеровать в порядке возрастания их величины:

$$k_1 < k_2 < \dots < k_N.$$

Как было отмечено выше, корень k_1 существует всегда. Максимальное количество корней N при данном значении Ka определяется из неравенств

$$(N-1)\pi/a \leq K < N\pi/a, \quad (14.13)$$

т. е.

$$Ka/\pi < N \leq Ka/\pi + 1.$$

Каждому корню k_n соответствует, как это видно из (14.6), собственное значение гамильтониана

$$E_n = (\hbar^2/2\mu)k_n^2 - V_0, \quad n = 1, 2, 3, \dots, N. \quad (14.14)$$

Другими словами, энергия связи частицы в яме принимает лишь определенные дискретные значения:

$$\varepsilon_n = -E_n = V_0 - (\hbar^2/2\mu)k_n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots, N. \quad (14.15)$$

Таким образом, все собственные функции, принадлежащие собственным значениям из интервала

$$-V_0 < E_n \leq 0,$$

могут быть разбиты на два класса:

(А) Собственные функции, принадлежащие собственным значениям E_1, E_3, E_5, \dots :

$$\psi_n(x) = \begin{cases} A_n e^{\varkappa_n x} & \text{при } x < -a/2, \\ B_n \cos k_n x & \text{при } -a/2 \leq x \leq a/2, \\ C_n e^{-\varkappa_n x} & \text{при } x > a/2, \end{cases}$$

$$n = 1, 3, 5, \dots,$$

$$A_n = C_n = B_n \exp\left(\frac{1}{2}\varkappa_n a\right) \cos \frac{k_n a}{2}, \quad \varkappa_n = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2\mu|E_n|}.$$

Все эти функции имеют положительную четность.

(В) Собственные функции, принадлежащие собственным значениям E_2, E_4, E_6, \dots :

$$\psi_n(x) = \begin{cases} A_n e^{\varkappa_n x} & \text{при } x > -a/2, \\ B_n \sin k_n x & \text{при } -a/2 \leq x \leq a/2, \\ C_n e^{-\varkappa_n x} & \text{при } x > a/2, \end{cases}$$

$$n = 2, 4, 6, \dots,$$

$$A_n = -C_n = -B_n \exp\left(\frac{1}{2} \varkappa_n a\right) \sin \frac{k_n a}{2}, \quad \varkappa_n = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2\mu |E_n|}.$$

Все эти функции имеют положительную четность.

Заметим, что по мере увеличения энергии состояния увеличивается количество узлов волновой функции (можно показать, что $\psi_n(x)$ имеет $n - 1$ узел).

Естественно, что во всех этих функциях, являющихся решениями однородного уравнения, остался неопределенным множитель B_n , который получает фиксированное значение, если воспользоваться условием нормировки

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = 1.$$

Нетрудно проверить, что при $E \leq -V_0$ наша задача на собственные значения нетривиальных решений не имеет.

Пусть теперь $E > 0$. Тогда во всех трех пространственных областях получаем в качестве линейно независимых решений синусы и косинусы, которые не являются квадратично интегрируемыми функциями на всей оси x . Такие решения существуют при любом значении энергии $E > 0$. Действительно, в каждой из 3-х пространственных областей в данном случае имеем по 2 константы интегрирования, т.е. всего 6 констант. Сшивание функций и их производных на двух границах накладывает только 4 условия, и оказывается, что требование непрерывности функции и ее производной может быть выполнено без ограничения на величину энергии E . Следовательно, каждая точка $E > 0$ принадлежит непрерывному спектру нашего гамильтониана; стационарных состояний при $E > 0$ нет.

Мы видим, что множество квадратично интегрируемых собственных функций нашего гамильтониана конечно (в частном

случае оно может сводиться всего к одной функции), а поэтому не может быть полным набором в L_2 (для получения набора, полного в смысле (2.20), это множество должно быть дополнено всеми линейно независимыми функциями непрерывного спектра).

Сравним результаты квантово-механического рассмотрения стационарного движения частицы в прямоугольной потенциальной яме с соответствующими результатами классического рассмотрения.

Ясно, что классическая частица с полной энергией $-V_0 \leq E < 0$ может находиться только в области (II) ($-a/2 \leq x \leq a/2$), поскольку в областях (I) и (III) ее полная энергия была бы меньше потенциальной, что в классической механике невозможно. В области (II) классическая частица может двигаться с любым значением энергии из интервала $(-V_0, 0)$.

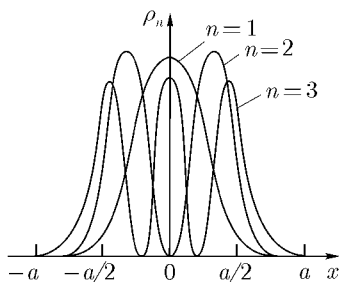


Рис. 6. Плотность $\rho_n(x)$ координатного распределения для стационарных состояний частицы в одномерной прямоугольной потенциальной яме при $n = 1, 2, 3$

Квантовое стационарное движение частицы в тех же условиях имеет совершенно другой характер. Энергия частицы может принимать лишь дискретный ряд значений (14.14), причем минимальное значение всегда больше минимума потенциальной энергии ($E_1 > -V_0$). Волновая функция любого стационарного состояния отлична от нуля в областях (I) и (III), т. е. частица с конечной вероятностью может находиться в области, запрещенной для классического движения. Плотность распределения координаты частицы для некоторых стационарных состояний представлена на рис. 6.

Поскольку вероятность нахождения частицы в области, запрещенной для классического движения, экспоненциально уменьшается при $|x| \rightarrow \infty$, можно условно считать, что частица, находящаяся в стационарном состоянии, совершает финитное движение.

Нетрудно проверить, что вероятность нахождения частицы в области, запрещенной для классического движения, стремится к нулю при увеличении энергии связи частицы. Поэтому на границе Σ бесконечно глубокой потенциальной ямы волновая функция обращается в нуль:

$$\psi|_{\Sigma} = 0. \quad (14.16)$$

§ 15. Импульсное распределение

Пусть $\Psi(\mathbf{r}, t)$ — волновая функция некоторого состояния частицы. Согласно (1.2) она однозначно определяет плотность распределения координаты частицы в любой момент времени:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2. \quad (15.1)$$

А что можно сказать о других физических величинах в этом состоянии, например, об импульсе частицы? Общее рассмотрение этого вопроса было проведено в лекции 1. Здесь мы воспользуемся полученными там результатами.

В классической механике в любой момент времени t можно указать как координату частицы $\mathbf{r}(t)$, так и ее импульс $\mathbf{p}(t)$. В квантовой же механике, как мы видели в §§ 4, 5, такое описание состояния принципиально невозможно. Действительно, из соотношения неопределенностей (5.2) для координаты и импульса непосредственно видно, что не существует состояний, в которых координата или импульс имели бы определенные значения. Более того, не существует и таких состояний, в которых неопределенности координаты и импульса одновременно были бы сколь угодно малы. Поэтому в квантовой механике даже невозможно ввести понятие совместного распределения \mathbf{r} и \mathbf{p} , поскольку операторы этих величин не коммутируют. Следовательно, в квантовой механике не имеет смысла вопрос о вероятности того, что импульс частицы примет значение из бесконечно малой окрестности некоторой точки \mathbf{p} при условии, что координата имеет значение, лежащее в бесконечно малой окрестности точки \mathbf{r} . Можно говорить только о вероятностях тех или иных значений координаты (импульса) относительно к тому, каковы значения импульса (координаты).

Координатное распределение дается формулой (15.1). Найдем импульсное распределение в том же состоянии $\Psi(\mathbf{r}, t)$. Для этого мы можем воспользоваться основными соотношениями (2.24) и (2.25), но сперва надо найти собственные функции (обобщенные собственные функции) оператора импульса \mathbf{p} .

Поскольку состояний с определенным значением импульса не существует, сразу можно утверждать, что дискретный спектр оператора импульса пуст. Для нахождения непрерывного спектра и обобщенных собственных функций надо в соответствии с (2.15) найти все решения уравнения

$$\hat{\mathbf{p}}\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \mathbf{p}\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}), \quad (15.2)$$

где

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla. \quad (15.3)$$

Нетрудно проверить, что это уравнение имеет при любом вещественном значении \mathbf{p} одно и только одно решение

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = C \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{r}\right), \quad (15.4)$$

где C — произвольная константа. Это значит, что спектр оператора импульса частицы занимает всю вещественную ось.

Функция $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ не является квадратично интегрируемой и согласно § 1 не может описывать какое-либо реальное состояние частицы. Действительно,

$$|\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})|^2 = |C|^2,$$

т. е. плотность вероятности обнаружить частицу в окрестности любой точки бесконечного пространства имела бы в этом состоянии одно и то же значение. Нелепость этого свойства с физической точки зрения указывает на невозможность реализации такого состояния. Однако совокупность функций $\{\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})\}$ для всевозможных значений \mathbf{p} является полным набором и может быть использована для разложения произвольной квадратично интегрируемой функции.

Воспользуемся критерием полноты (2.19) для определения нормировочной константы C функции $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$:

$$\int \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{p}'}^*(\mathbf{r}')d^3\mathbf{p} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{p}'). \quad (15.5)$$

Подставляя сюда (15.4), получаем

$$|C|^2 \int \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\right) d^3\mathbf{p} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'),$$

откуда, воспользовавшись равенством (Д4.6)

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = (2\pi\hbar)^{-3} \int \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\right) d^3\mathbf{p},$$

находим

$$C = (2\pi\hbar)^{-3/2}.$$

Таким образом,

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{r}\right) \quad (15.6)$$

есть обобщенная собственная функция оператора импульса частицы, нормировка которой определяется соотношением (15.5). Легко видеть, что эта функция удовлетворяет также обобщенно-му условию ортонормированности (2.17)

$$\int \psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'). \quad (15.7)$$

Найденные обобщенные собственные функции $\{\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})\}$ позволяют найти распределение импульса частицы в любом состоянии $\Psi(\mathbf{r}, t)$. Согласно (2.25) плотность импульсного распределения в точке \mathbf{p} в момент времени t есть

$$\rho(\mathbf{p}, t) = |a(\mathbf{p}, t)|^2, \quad (15.8)$$

где

$$a(\mathbf{p}, t) = \langle \psi_{\mathbf{p}} | \Psi \rangle = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{r}} \Psi(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r}. \quad (15.9)$$

Функция $a(\mathbf{p}, t)$ полностью определяет импульсное распределение в данном состоянии. Ее можно назвать *амплитудой импульсного распределения* аналогично тому, что волновую функцию $\Psi(\mathbf{r}, t)$ называют амплитудой координатного распределения в данном состоянии.

Поскольку координатное распределение нормировано на единицу ($\|\Psi\| = 1$), то, как легко проверить,

$$\int \rho(\mathbf{p}, t) d^3\mathbf{p} = \int |a(\mathbf{p}, t)|^2 d^3\mathbf{p} = 1, \quad (15.10)$$

т. е. импульсное распределение тоже нормировано на единицу.

В частном случае, когда $\Psi(\mathbf{r}, t)$ есть волновая функция стационарного состояния, согласно (9.4) и (15.9) имеем

$$\rho(\mathbf{p}, t) = \rho(\mathbf{p}, t = 0), \quad (15.11)$$

т. е. плотность импульсного распределения не зависит от времени, что находится в полном соответствии с общим утверждением (9.6) о сохранении в стационарном состоянии распределения любой физической величины, оператор которой не зависит явно от времени.

Отметим, что при $|\mathbf{p}| \rightarrow \infty$ плотность импульсного распределения в любом состоянии стремится к нулю, потому что в интеграле (15.9) имеется осциллирующая знакопеременная функция

$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \mathbf{r}\right)$, период осцилляций которой стремится к нулю при увеличении $|\mathbf{p}|$.

В качестве примера рассмотрим импульсное распределение в стационарном состоянии движения частицы в одномерной прямоугольной потенциальной яме, причем для простоты будем считать, что глубина ямы бесконечна:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{при } x \leq 0, \\ 0 & \text{при } 0 < x < a, \\ \infty & \text{при } x \geq a. \end{cases} \quad (15.12)$$

Для нахождения стационарных состояний надо решить краевую задачу:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} &= E\psi(x), \quad 0 < x < a, \quad E > 0, \\ \psi(0) &= \psi(a) = 0. \end{aligned} \quad (15.13)$$

Здесь было использовано граничное условие (14.16). Решение этой задачи (см. упражнение 4.7) имеет вид

$$\begin{aligned} \psi_n(x) &= \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin k_n x; \quad k_n = \frac{n\pi}{a}; \\ E_n &= \frac{\hbar^2 k_n^2}{2\mu}; \quad n = 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (15.14)$$

Для амплитуды импульсного распределения в стационарном состоянии ψ_n согласно (15.9) получаем

$$\begin{aligned} a_n(p) &= (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_0^a e^{-\frac{i}{\hbar} px} \psi_n(x) dx = \\ &= (\pi\hbar a)^{-1/2} \int_0^a e^{-\frac{i}{\hbar} px} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) dx. \end{aligned} \quad (15.15)$$

В частности, для основного состояния ψ_1 имеем

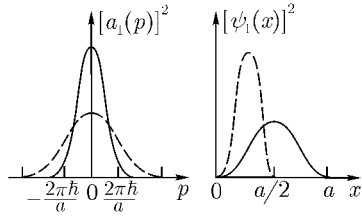
$$a_1(p) = \frac{\sqrt{\pi a/\hbar}}{\pi^2 - a^2 p^2/\hbar^2} \left(1 + \cos \frac{ap}{\hbar} - i \sin \frac{ap}{\hbar}\right), \quad (15.16)$$

$$|a_1(p)|^2 = \frac{4\pi a}{\hbar} \frac{\cos^2(ap/2\hbar)}{(\pi^2 - a^2 p^2/\hbar^2)^2}. \quad (15.17)$$

Сравним форму импульсного распределения (15.17) с формой координатного распределения в этом же состоянии:

$$|\psi_1(x)|^2 = \frac{2}{a} \sin^2 \frac{\pi}{a} x, \quad (15.18)$$

$$0 < x < a.$$



Оба распределения изображены на рис. 7. Мы видим, что ширина координатного распределения характеризуется величиной a , а ширина импульсного — величиной \hbar/a . Поэтому при уменьшении ширины ямы a координатное распределение становится уже, а импульсное — шире. Этот результат, конечно, согласуется с соотношением неопределенностей (5.2) для координаты и импульса.

Рис. 7. Импульсное и координатное распределения для основного состояния частицы в бесконечно глубокой прямоугольной яме шириной a (сплошные кривые) и $a/2$ (пунктирные кривые)

§ 16. Свободное движение частицы

Свободная частица, движущаяся в отсутствие каких-либо внешних полей, является простейшей физической системой. Однако в математическом отношении задача о движении квантовой свободной частицы несколько сложнее, чем рассмотренные выше задачи о движении частицы в поле гармонического осциллятора и прямоугольной потенциальной ямы.

В классической механике частица, на которую не действуют внешние силы, движется с постоянной скоростью, а ее траектория представляет собой прямую линию. В квантовой механике движение свободной частицы описывается уравнением Шредингера с гамильтонианом, который сводится к оператору кинетической энергии частицы

$$\hat{H}_0 = \hat{T} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} = -\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\right) \nabla^2. \quad (16.1)$$

Начнем со стационарного уравнения Шредингера для свободной частицы

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\right) \nabla^2 \psi_E(\mathbf{r}) = E \psi_E(\mathbf{r}). \quad (16.2)$$

Прежде чем решать это уравнение, рассмотрим вопрос об интегралах движения в рассматриваемой системе. Легко проверить, что оператор импульса частицы $\widehat{\mathbf{p}}$, оператор квадрата ее момента количества движения $\widehat{\mathbf{L}}^2$ и все три оператора проекций момента $\{\widehat{L}_i\}_1^3$ коммутируют с гамильтонианом (16.1):

$$[\widehat{p}_i, \widehat{H}_0] = 0; \quad [\widehat{L}_i, \widehat{H}_0] = 0; \quad [\widehat{\mathbf{L}}^2, \widehat{H}_0] = 0.$$

Следовательно, каждая из этих физических величин сохраняется при свободном движении частицы. Согласно теореме о коммутирующих операторах (§ 4) коммутативность некоторого оператора с гамильтонианом \widehat{H} означает, что существует общий полный набор собственных функций и обобщенных собственных функций гамильтониана \widehat{H} и этого оператора. Заметим, однако, что не все эти операторы $\widehat{\mathbf{p}}$, $\widehat{\mathbf{L}}$, $\widehat{\mathbf{L}}^2$ коммутируют друг с другом:

$$[\widehat{p}_i, \widehat{L}_k] \neq 0 \quad \text{при } i \neq k, \quad [\widehat{p}_i, \widehat{\mathbf{L}}^2] \neq 0$$

(см. упражнение 1.7).

Следовательно, не существует совместного распределения E , \mathbf{p} и \mathbf{L} или E , \mathbf{p} и \mathbf{L}^2 . Наоборот, для E , \mathbf{L}^2 и L_i существует общий полный набор собственных состояний, но они не являются собственными состояниями оператора импульса $\widehat{\mathbf{p}}$. Таким образом, существует несколько различных полных наборов собственных функций и обобщенных собственных функций гамильтониана, описывающего свободное движение частицы: а) E , \mathbf{p} , б) E , p_z , L_z и т. д.

Начнем с нахождения общих собственных функций \widehat{H}_0 и $\widehat{\mathbf{p}}$. Эти функции $\psi_{E,\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ должны одновременно удовлетворять следующим уравнениям:

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\right)\nabla^2\psi_{E,\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = E\psi_{E,\mathbf{p}}(\mathbf{r}), \quad (16.3)$$

$$-i\hbar\nabla\psi_{E,\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \mathbf{p}\psi_{E,\mathbf{p}}(\mathbf{r}), \quad (16.4)$$

где E и $\mathbf{p} = \{p_x, p_y, p_z\}$ — точки спектров операторов энергии и импульса.

Решение уравнения (16.4) согласно (15.6) есть

$$\psi_{E,\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{r}\right). \quad (16.5)$$

Легко проверить, что эта функция удовлетворяет также уравнению (16.3), если положить

$$E = \mathbf{p}^2/2\mu. \quad (16.6)$$

Следовательно, общее решение уравнений (16.3) и (16.4) существует при любом значении \mathbf{p} и дается формулой (16.5). Соответствующее значение энергии E однозначно определяется импульсом \mathbf{p} по формуле (16.6), а поэтому энергия и импульс при свободном движении не являются независимыми величинами. В § 4 было введено понятие полного набора физических величин. Мы видим, что при свободном движении частицы одним из возможных полных наборов является совокупность трех компонент импульса $\mathbf{p} = \{p_x, p_y, p_z\}$. В дальнейшем индекс E в формуле (16.5) будем опускать, поскольку он является лишним.

Итак, уравнения (16.3) и (16.4) имеют решение в виде функции (16.5), которая не является квадратично интегрируемой. Дискретный спектр операторов \hat{H}_0 и $\hat{\mathbf{p}}$ пуст, и не существует ни одного состояния свободного движения, в котором энергия и импульс имели бы определенные значения. Другими словами, стационарных состояний свободного движения нет. Подставляя (16.5) в (9.4), получаем решение временного уравнения Шредингера (6.1) в виде

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)\right). \quad (16.7)$$

Если ввести обозначения

$$\mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}, \quad \omega = \frac{E}{\hbar}, \quad (16.8)$$

то (16.7) примет вид

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = C \exp(i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)). \quad (16.9)$$

Такая функция широко используется в классической физике для описания монохроматической плоской волны с частотой ω , распространяющейся в направлении волнового вектора \mathbf{k} . По аналогии функция (16.7), соответствующая движению свободной частицы, называется плоской волной, а величины \mathbf{k} и ω называются волновым вектором и частотой этой плоской волны. Соотношения (16.8), устанавливающие связь между волновыми и корпускулярными характеристиками частицы, называются *соотношениями де Бройля*.

Теперь рассмотрим задачу о свободном движении частицы в той же постановке, в которой мы рассмотрели в § 13 движение квантового осциллятора. Для этого необходимо задать волновую функцию частицы в начальный момент времени, а дальнейшая эволюция состояния определяется временным уравнением Шредингера (6.1). Для простоты рассмотрим одномерное движение вдоль оси x с начальным условием

$$\psi(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{b\sqrt{\pi}}} \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{2b^2}\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_0 x\right). \quad (16.10)$$

Согласно (13.1) и (13.4) средние значения и дисперсии координаты и импульса в этом состоянии есть

$$\bar{x} = x_0, \quad \bar{p} = p_0, \quad (16.11)$$

$$D_x = \frac{b^2}{2}, \quad D_p = \frac{\hbar^2}{2b^2}. \quad (16.12)$$

Для нахождения функции $\psi(x, t)$ при $t > 0$ воспользуемся методом функции Грина, изложенным в § 10. В нашем случае согласно (16.6)

$$E = \frac{p^2}{2\mu},$$

а функция Грина (10.10) принимает вид

$$G(x, x', t) = \int \psi_p(x) \psi_p^*(x') \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2\mu} t\right) dp,$$

где согласно (15.6)

$$\psi_p(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right). \quad (16.13)$$

В результате интегрирования получаем

$$G(x, x', t) = \sqrt{\frac{\mu}{2\pi i \hbar t}} \exp\left(\frac{i\mu(x - x')^2}{2\hbar t}\right). \quad (16.14)$$

Согласно (10.11) волновая функция рассматриваемого состояния при $t > 0$ есть

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x, x', t) \psi(x', 0) dx'.$$

Подставляя сюда (16.14) и (16.10), получаем

$$\begin{aligned} \psi(x, t) = & [\pi b^2(1 + \hbar^2 t^2 / \mu^2 b^4)]^{-1/4} \times \\ & \times \exp \left[-\frac{(x - x_0 - p_0 t / \mu)^2}{2b^2(1 + \hbar^2 t^2 / \mu^2 b^4)} (1 - i \hbar t / \mu b^2) - \frac{i p_0^2 t}{2\mu \hbar} + \frac{i}{\hbar} p_0 x \right]. \end{aligned} \quad (16.15)$$

Найдем средние значения координаты и импульса в этом состоянии:

$$\bar{x}(t) = x_0 + \frac{p_0}{\mu} t, \quad \bar{p}(t) = p_0. \quad (16.16)$$

Мы видим, что «в среднем» свободная квантовая частица движется так же, как классическая, начинающая движение из точки $x = x_0$ с импульсом p_0 . Однако в квантовом случае в заданный момент t координата частицы не имеет определенного значения: она «размазана» вокруг точки $\bar{x}(t)$ с дисперсией

$$D_x(t) = \frac{b^2}{2} \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{\mu^2 b^4} \right), \quad (16.17)$$

которая с течением времени увеличивается. При этом плотность координатного распределения есть

$$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2 = (2\pi D_x(t))^{-1/2} \exp \left(-\frac{(x - \bar{x})^2}{2D_x(t)} \right), \quad (16.18)$$

т. е. волновой пакет (16.15), описывающий состояние свободного движения частицы, «расплывается» с течением времени. Скорость этого расплывания можно характеризовать временем τ , в течение которого первоначальная (при $t = 0$) дисперсия координаты $D_x = b^2/2$ удваивается:

$$\tau = \frac{\mu b^2}{\hbar}. \quad (16.19)$$

Мы видим, что чем меньше первоначальная неопределенность координаты, тем быстрее происходит расплывание пакета. Это явление не имеет аналога в классической механике, поскольку размеры области локализации классической корпускулы в данный момент времени полностью определяются ее собственными размерами и не зависят от времени.

Дисперсия импульса в состоянии (16.15) есть

$$D_p = \frac{\hbar^2}{2b^2}. \quad (16.20)$$

Она, как и \bar{p} , не зависит от времени, что и должно быть для интеграла движения.

Если область первоначальной локализации частицы очень велика ($b \rightarrow \infty$), распыление пакета происходит настолько медленно, что в течение большого промежутка времени не происходит заметного изменения дисперсии D_x , причем $D_p \rightarrow 0$. Следовательно, в этом случае свободное движение частицы очень похоже на распространение монохроматической плоской волны. Увеличивая b , можно сколь угодно приближаться к состоянию плоской волны, однако состояние с $D_p = 0$ не может быть реализовано никогда. Заметим, что дисперсия координаты $D_x(t)$ согласно (16.17) не зависит от среднего импульса частицы p_0 . Поэтому рассмотренная картина распыления пакета имеет место и в том случае, когда частица в среднем покоится ($\bar{p}(t) = 0, \bar{x}(t) = x_0$).

§ 17. Инфинитное движение в поле прямоугольной потенциальной ямы

В § 14 мы показали, что стационарное движение квантовой частицы в прямоугольной потенциальной яме возможно только в некоторых специальных состояниях при определенных отрицательных значениях полной энергии. При этом движение всегда финитно.

Все другие состояния являются нестационарными. В зависимости от начальных условий движение может быть как финитным, так и инфинитным. В качестве примера инфинитного движения рассмотрим движение частицы, начальное состояние которой при $t = 0$ задается волновой функцией (16.10), причем будем считать, что координата x_0 , определяющая исходное положение частицы, лежит далеко вне ямы слева от нее.

Эволюция состояния полностью определяется уравнением Шредингера и начальным условием:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi, \quad (17.1)$$

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{b\sqrt{\pi}}} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2b^2}\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_0 x\right).$$

В данном случае задача оказывается достаточно сложной и не может быть решена аналитически. Поэтому мы рассмотрим результаты численного решения задачи (17.1) для некоторых харак-

терных моментов времени. На рис. 8 изображена плотность координатного распределения $\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2$ для этих моментов времени.

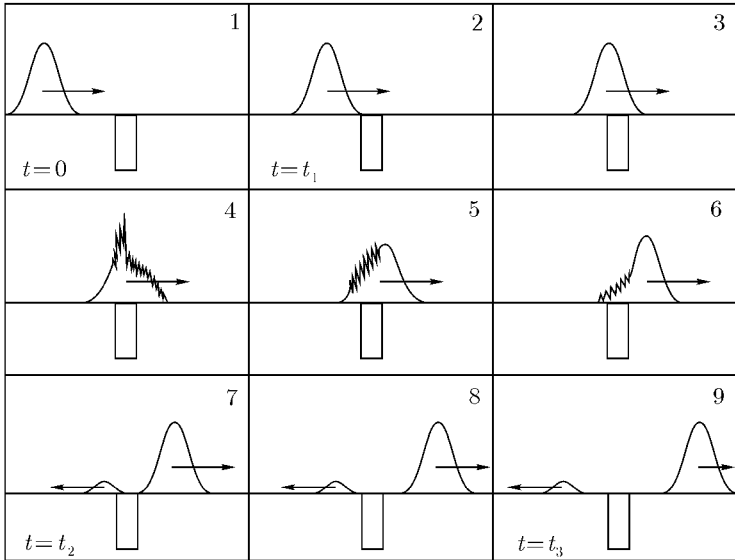


Рис. 8. Инфинитное движение частицы в поле прямоугольной потенциальной ямы

При $p_0 > 0$ частица начинает двигаться, приближаясь к потенциальной яме. В интервале $0 < t < t_1$ происходит свободное движение волнового пакета. При этом в соответствии с § 16 происходит его «расплывание». При $t = t_1$ пакет входит в область взаимодействия. В результате взаимодействия к моменту $t = t_2$ пакет «раздваивается»: одна его часть продолжает движение в первоначальном направлении, а другая испытывает «отражение». Подчеркнем, что как прошедший, так и отраженный пакеты соответствуют состоянию одной и той же частицы, т. е. частица как бы «размазывается» по обоим пакетам. К моменту $t = t_3$ оба пакета настолько далеко находятся от области взаимодействия, что могут считаться свободными.

Вероятность того, что частица окажется в отраженном пакете, называется *коэффициентом отражения* R . Вероятность оказаться в другом пакете называется *коэффициентом проходе-*

ния T . Из условия нормировки волновой функции на единицу имеем

$$R + T = 1. \quad (17.2)$$

При фиксированной ширине ямы соотношение между R и T зависит от отношения средней энергии частицы к глубине ямы: при возрастании этого отношения коэффициент T увеличивается, стремясь к единице. Отметим, что при движении классической частицы с положительной энергией всегда $T = 1$, т. е. нет классического аналога явлению отражения квантовой частицы.

§ 18. Импульсное представление. Эквивалентность импульсного и координатного представлений. Уравнение Шредингера в импульсном представлении

В § 15 при нахождении импульсного распределения в состоянии $\Psi(\mathbf{r}, t)$ мы ввели функцию $a(\mathbf{p}, t)$, которую назвали амплитудой импульсного распределения. Согласно (15.9) она связана с функцией $\Psi(\mathbf{r}, t)$ преобразованием Фурье, которое устанавливает взаимно однозначное соответствие этих двух функций. При этом в силу (15.10) обе функции нормированы на единицу. Следовательно, $a(\mathbf{p}, t)$ и $\Psi(\mathbf{r}, t)$ дают эквивалентное описание заданного состояния физической системы. Поэтому $a(\mathbf{p}, t)$ называют волновой функцией состояния в *импульсном представлении* (p -представление), а $\Psi(\mathbf{r}, t)$ — волновой функцией того же состояния в *координатном представлении* (x -представление).

Итак, с помощью преобразования Фурье мы можем все функции пространства состояний L_2 , заданные в координатном представлении, перевести в импульсное представление. При этом преобразовании сохраняется квадратичная интегрируемость функций. Поэтому множество всех функций в p -представлении тоже является пространством L_2 . Действительно, изменение представления эквивалентно использованию другого набора динамических переменных, а их явный вид при определении пространства L_2 не существен.

При изменении представления изменяется вид операторов. Обозначим через $\hat{F}^{(x)}$ эрмитов оператор некоторой физической величины F в координатном представлении, а через $\hat{F}^{(p)}$ — оператор этой же величины в импульсном представлении. Найдем связь между ними.

Согласно (15.9) волновой функции $\Psi(\mathbf{r}, t)$ некоторого состояния в x -представлении ставится в соответствие волновая функция в p -представлении:

$$a(\mathbf{p}, t) = \langle \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) | \Psi(\mathbf{r}, t) \rangle, \quad (18.1)$$

где согласно (15.6)

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \mathbf{r}\right) \quad (18.2)$$

есть нормированная в соответствии с условием полноты обобщенная собственная функция оператора импульса частицы в x -представлении. Теперь рассмотрим функцию $\hat{F}^{(x)}\Psi(\mathbf{r}, t)$, заданную в x -представлении. В p -представлении ей соответствует некоторая функция

$$A(\mathbf{p}, t) = \langle \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) | \hat{F}^{(x)}\Psi(\mathbf{r}, t) \rangle = \langle \hat{F}^{(x)}\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) | \Psi(\mathbf{r}, t) \rangle. \quad (18.3)$$

Мы воспользовались здесь общим определением (18.1) и свойством (Д2.6) эрмитова оператора. В силу взаимно однозначной связи функций одного и того же состояния в x - и p -представлениях действие оператора $\hat{F}^{(p)}$ на функцию $a(\mathbf{p}, t)$ должно приводить к той же функции $A(\mathbf{p}, t)$, т. е.

$$\hat{F}^{(p)}a(\mathbf{p}, t) = A(\mathbf{p}, t). \quad (18.4)$$

Подставляя сюда (18.1) и (18.3), получаем соотношение

$$\hat{F}^{(p)}\langle \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) | \Psi(\mathbf{r}, t) \rangle = \langle \hat{F}^{(x)}\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) | \Psi(\mathbf{r}, t) \rangle, \quad (18.5)$$

устанавливающее связь между операторами $\hat{F}^{(p)}$ и $\hat{F}^{(x)}$.

Найдем явный вид оператора $\hat{\mathbf{p}}^{(p)}$ импульса в импульсном представлении. В координатном представлении для оператора импульса имеем

$$\hat{\mathbf{p}}^{(x)}\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = -i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}(2\pi\hbar)^{-3/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \mathbf{r}\right) = \mathbf{p}\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}).$$

Подставляя это соотношение в (18.5) и используя (18.1), получаем

$$\hat{\mathbf{p}}^{(p)}a(\mathbf{p}, t) = \mathbf{p}a(\mathbf{p}, t). \quad (18.6)$$

Поскольку это равенство выполняется для произвольной функции $a(\mathbf{p}, t)$, получаем

$$\widehat{\mathbf{p}}^{(p)} = \mathbf{p}, \quad (18.7)$$

т. е. действие оператора импульса на любую функцию в p -представлении сводится к умножению ее на независимую переменную в этом представлении \mathbf{p} .

Далее найдем явный вид оператора $\widehat{\mathbf{r}}^{(p)}$ координаты в импульсном представлении. В координатном представлении для оператора координаты имеем

$$\widehat{\mathbf{r}}^{(x)}\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \mathbf{r}(2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{r}\right) = -i\hbar\nabla_{\mathbf{p}}(2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{r}\right),$$

т. е.

$$\widehat{\mathbf{r}}^{(x)}\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = -i\hbar\nabla_{\mathbf{p}}\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}).$$

Подставим это соотношение в (18.5), используя (18.1):

$$\widehat{\mathbf{r}}^{(p)}a(\mathbf{p}, t) = \langle (-i\hbar\nabla_{\mathbf{p}}\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})) | \Psi(\mathbf{r}, t) \rangle = i\hbar\nabla_{\mathbf{p}}a(\mathbf{p}, t), \quad (18.8)$$

откуда находим

$$\widehat{\mathbf{r}}^{(p)} = i\hbar\nabla_{\mathbf{p}}. \quad (18.9)$$

Следовательно, действие оператора координаты на любую функцию в p -представлении сводится к дифференцированию по независимой переменной \mathbf{p} и умножению на константу $i\hbar$.

Легко проверить, что найденные операторы $\widehat{\mathbf{p}}^{(p)}$ и $\widehat{\mathbf{r}}^{(p)}$ удовлетворяют перестановочному соотношению (3.5).

Теперь рассмотрим важный вопрос о соотношении импульсного и координатного представлений. На первый взгляд кажется, что имеется асимметрия во введении понятий x - и p -представлений. Действительно, согласно (18.1) волновая функция в p -представлении вводится через скалярное произведение волновой функции состояния (в координатном представлении) и обобщенной собственной функции оператора импульса $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ (тоже в координатном представлении). В то же время волновая функция состояния в x -представлении вводилась у нас как первичное понятие. На самом деле никакой асимметрии нет, поскольку волновая функция в x -представлении тоже может быть представлена в виде скалярного произведения, содержащего обобщенную собственную функцию оператора координаты.

Найдем обобщенные собственные функции оператора координаты:

$$\widehat{\mathbf{r}}\psi_{\rho}(\xi) = \rho\psi_{\rho}(\xi) \quad (18.10)$$

Проще всего это уравнение решается в импульсном представлении. Используя (18.9), записываем его в виде

$$i\hbar\nabla_{\mathbf{p}}\psi_{\rho}(\mathbf{p}) = \rho\psi_{\rho}(\mathbf{p}). \quad (18.11)$$

Сравнивая это уравнение с уравнением (15.2), видим, что они отличаются только обозначением независимой переменной и знаком перед мнимой единицей. Поэтому аналогично (15.6) получаем

$$\psi_{\rho}(\mathbf{p}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\rho\right). \quad (18.12)$$

Это есть нормированная в соответствии с условием полноты обобщенная собственная функция оператора координаты в импульсном представлении, соответствующая точке непрерывного спектра $\mathbf{r} = \rho$. Конечно, найденное решение не может описывать какое-либо реальное состояние, что находится в полном соответствии с тем, что не существует ни одного состояния с определенным значением координаты (см. § 5).

С помощью (18.1) можно легко перевести функцию (18.12) в координатное представление:

$$\psi_{\rho}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \rho). \quad (18.13)$$

Это есть нормированная в соответствии с условием полноты обобщенная собственная функция оператора координаты в координатном представлении. Нетрудно видеть, что она удовлетворяет условию (2.17) ортонормированности функций непрерывного спектра:

$$\int \psi_{\rho}^*(\mathbf{r})\psi_{\rho'}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \delta(\rho - \rho'). \quad (18.14)$$

Согласно (Д4.12) для произвольной функции $\Psi(\mathbf{r}, t)$ можем написать

$$\Psi(\rho, t) = \int \psi_{\rho}^*(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r}. \quad (18.15)$$

Это значит, что любая волновая функция в координатном представлении всегда может быть представлена в виде скалярного произведения типа (18.1) с обобщенной собственной функцией оператора координаты.

Конечно, в этом скалярном произведении обе функции должны быть взяты в одном и том же представлении. В данном случае это x -представление. Покажем, что при переходе к импульсному

представлению результат не изменится. Волновая функция состояния в p -представлении дается формулой (18.1). Найдем скалярное произведение этой функции с обобщенной собственной функцией оператора координаты в p -представлении:

$$\langle \psi_\rho(\mathbf{p}) | a(\mathbf{p}, t) \rangle = \int \psi_\rho^*(\mathbf{p}) a(\mathbf{p}, t) d^3 \mathbf{p}.$$

Подставляя сюда (18.12) и (18.1), находим

$$\langle \psi_\rho(\mathbf{p}) | a(\mathbf{p}, t) \rangle = \Psi(\rho, t). \quad (18.16)$$

Сравнивая этот результат с (18.15), видим, что скалярное произведение действительно не зависит от выбора представления.

Таким образом, координатное и импульсное представления эквивалентны как с точки зрения описания состояний физических систем, так и в отношении структуры соответствующих математических выражений.

Теперь займемся важной задачей преобразования уравнения Шредингера из координатного представления в импульсное. Если гамильтониан частицы в координатном представлении имеет вид (8.1)

$$\hat{H}^{(x)} = \hat{\mathbf{p}}^2/2\mu + V(\mathbf{r}), \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}, \quad (18.17)$$

то в импульсном представлении согласно (18.7) и (18.9) он может быть записан так:

$$\hat{H}^{(p)} = \mathbf{p}^2/2\mu + V(\hat{\mathbf{r}}^{(p)}), \quad \hat{\mathbf{r}}^{(p)} = i\hbar\nabla_{\mathbf{p}}. \quad (18.18)$$

Здесь $V(\hat{\mathbf{r}}^{(p)})$ является операторной функцией, и ее действие на произвольную волновую функцию $a(\mathbf{p}, t)$ в импульсном представлении определяется соотношением (ДЗ.6). Для записи его в явном виде мы должны взять в качестве функций $\chi_f(\xi)$ обобщенные собственные функции $\psi_\rho(\mathbf{p})$ оператора координаты $\mathbf{r}^{(p)}$ в импульсном представлении. Тогда получаем

$$V(\hat{\mathbf{r}}^{(p)})a(\mathbf{p}, t) = \int \langle \psi_\rho(\mathbf{p}') | a(\mathbf{p}', t) \rangle V(\rho) \psi_\rho(\mathbf{p}) d^3 \rho.$$

Подставляя сюда $\psi_\rho(\mathbf{p})$ из (18.12), находим

$$V(\hat{\mathbf{r}}^{(p)})a(\mathbf{p}, t) = \int W(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) a(\mathbf{p}', t) d^3 \mathbf{p}', \quad (18.19)$$

где

$$W(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) = (2\pi\hbar)^{-3} \int V(\mathbf{r}) \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}' - \mathbf{p})\mathbf{r}\right) d^3\mathbf{r} \quad (18.20)$$

есть оператор потенциальной энергии в импульсном представлении. Он получается из оператора $V(\mathbf{r})$ потенциальной энергии в координатном представлении с помощью преобразования Фурье. Мы видим, что этот оператор является линейным интегральным оператором. Он зависит от двух независимых переменных \mathbf{p} и \mathbf{p}' . Такие потенциалы называются *нелокальными* в отличие от *локальных* потенциалов, являющихся функциями одной независимой переменной.

Мы видим, что в x -представлении оператор потенциальной энергии $V(\mathbf{r})$ является локальным, а в импульсном представлении становится нелокальным.

Рассмотрим сферически симметричный потенциал $V(\mathbf{r}) = V(|\mathbf{r}|)$. В этом случае интегрирование по угловым переменным в (18.20) легко выполняется, если полярную ось сферической системы координат направить по вектору

$$\mathbf{q} = \frac{1}{\hbar}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}). \quad (18.21)$$

Получаем

$$W(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) = \frac{1}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty V(r) \frac{\sin qr}{q} r dr, \quad (18.22)$$

т. е. в этом случае W не зависит от направления вектора \mathbf{q} .

Важный частный случай:

$$V(r) = Ae^{-\varkappa r}/r, \quad (18.23)$$

где A и \varkappa — некоторые константы, причем $\varkappa \geq 0$. Подставляя (18.23) в (18.22), получаем

$$W(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) = \frac{1}{2\pi^2\hbar} \frac{A}{\hbar^2\varkappa^2 + (\mathbf{p}' - \mathbf{p})^2}. \quad (18.24)$$

Если потенциал $V(\mathbf{r})$ представим в виде ряда Тейлора, то нет необходимости пользоваться общей формулой (18.20). Значительно проще воспользоваться формулой (3) для операторной

функции и записать потенциал в p -представлении. Сделаем это для частного случая потенциала осциллятора:

$$V(\mathbf{r}) = \text{const } \mathbf{r}^2. \quad (18.25)$$

В p -представлении он принимает вид

$$V(\hat{\mathbf{r}}^{(p)}) = \text{const } (\hat{\mathbf{r}}^{(p)})^2; \quad \hat{\mathbf{r}}^{(p)} = i\hbar \nabla_{\mathbf{p}}. \quad (18.26)$$

Таким образом, если потенциал в x -представлении может быть разложен в ряд Тейлора, то в p -представлении он может быть представлен в виде дифференциального оператора.

В общем случае потенциал взаимодействия в импульсном представлении дается формулой (18.20), а уравнение Шредингера (7.1) в этом представлении принимает вид

$$i\hbar \frac{\partial a(\mathbf{p}, t)}{\partial t} = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} a(\mathbf{p}, t) + \int W(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) a(\mathbf{p}', t) d^3 \mathbf{p}'. \quad (18.27)$$

Следовательно, в импульсном представлении уравнение Шредингера в общем случае является интегродифференциальным уравнением. В частном случае потенциала (18.25) оно может быть представлено в виде дифференциального уравнения.

Уравнение Шредингера в p -представлении, конечно, эквивалентно уравнению Шредингера в x -представлении, поскольку одно получается из другого преобразованием Фурье. Однако в некоторых случаях уравнение в p -представлении решается проще, и этим широко пользуются в практических расчетах.

Упражнения к лекции 4

4.1. Найти распределение импульса частицы в основном состоянии линейного гармонического осциллятора.

4.2. Найти распределение импульса электрона в основном состоянии атома водорода (см. упражнение 1.6).

4.3. Записать гамильтониан линейного гармонического осциллятора в импульсном представлении.

4.4. Найти общее решение стационарного уравнения Шредингера для линейного гармонического осциллятора в импульсном представлении, воспользовавшись известным решением в координатном представлении. Получить тот же результат, решая непосредственно уравнение Шредингера в импульсном представлении.

4.5. Записать волновую функцию свободной частицы в импульсном представлении.

4.6. Получить приближенное выражение для энергии связи частицы с массой μ в одномерной прямоугольной яме конечной глубины V_0 , если ширина ямы a удовлетворяет соотношению $a \ll \hbar(2\mu V_0)^{-1/2}$. Оценить вероятность пребывания частицы внутри и вне ямы.

4.7. Проверить выполнение соотношения неопределенностей для координаты и импульса частицы, движущейся в одномерной прямоугольной яме с бесконечно высокими стенками.

4.8. Показать, что все точки непрерывного спектра при движении частицы в одномерной прямоугольной яме с одной бесконечно высокой стенкой невырождены.

4.9. Показать, что плоская волна (16.5) является обобщенной собственной функцией оператора \hat{L}_z и принадлежит собственному значению $L_z = 0$, если ось z направлена по вектору \mathbf{p} .

4.10. Записать кулоновский потенциал $V(r) = \frac{e_1 e_2}{r}$ в импульсном представлении.

ЛЕКЦИЯ 5

§ 19. Эквивалентные представления

В § 18 мы показали, как преобразуются волновые функции и операторы, если вместо пространственной координаты частицы \mathbf{r} взять в качестве независимой переменной ее импульс \mathbf{p} . Мы видели, что волновые функции подвергаются при этом преобразованию Фурье (18.1), которое является линейным и сохраняет нормировку волновой функции (см. (15.10)).

Теперь рассмотрим случай перехода от исходного к некоторому произвольному представлению. Обозначим через \hat{S} линейный оператор соответствующего преобразования волновых функций. Пусть ψ — волновая функция некоторого состояния в исходном представлении, тогда волновая функция этого же состояния в другом представлении есть

$$\psi' = \hat{S}\psi. \quad (19.1)$$