

$$\Psi = \varphi(x, y, z) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Оба случая могут быть охвачены одной формулой

$$\psi = \varphi(x, y, z) u(m_s),$$

откуда и следует, что квантовое число проекции спина  $m_s$  включается в набор квантовых чисел, задающих состояние электрона (так мы поступили ранее, в § 13, п. 2). Например, электрон в центрально-симметричном кулоновском поле описывается функцией (13.9)

$$\Psi_{nlmm_s}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) u(m_s).$$

При использовании этой функции состояния следует учитывать, что спиновые операторы действуют только на спиновую функцию  $u(m_s)$ , т. е. на один из сомножителей в выражении функции. В свою очередь операторы, действующие на пространственные переменные, не затрагивают спиновой части функции состояния. Их следует применять только к сомножителям, зависящим от координат. Поэтому  $\hat{S}^2$  и  $\hat{S}_z$  коммутируют с операторами  $\hat{L}^2$ ,  $\hat{L}_z$  и гамильтонианом (10.14). Волновая функция (13.17) для электрона в этом атоме водорода является собственной функцией всех пяти операторов.

### Методические указания и рекомендации

**I.** Задача об атоме водорода является для элементарного курса квантовой механики центральной; в процессе ее решения студенты знакомятся с решением научной проблемы, которое всего лишь полвека тому назад было достигнуто в результате работ гениальных ученых, определивших прогресс физической науки. Если многие вопросы из предыдущих глав требуют усвоения на уровне запоминания и применения (операторы, основные положения и т. д.), то здесь речь идет прежде всего о понимании и воспроизведении (при запоминании принципиальных конечных результатов).

Специфичен методический вопрос о выкладках при решении водородной задачи. Так как выполнить их подробно на лекциях невозможно — потерянется логическая нить главного,— то часть выкладки (например, все преобразования радиального уравнения до подстановки степенного ряда) желательно перенести на практические занятия.

При изучении орбитального магнитного момента атома мы ввели в курс соответствующий оператор, так как имеющее место в учебной литературе изложение вопроса на основе классической по существу модели электронного облака не исчерпывающее (см. пример 12.2).

Понятие о спине вводится в элементарном курсе с опорой на эксперимент как дополнительное положение к уравнению Шредингера. Изучение спина может быть выполнено без раскрытия вида его операторов и функций, но предусмотрена возможность и углубленного варианта (см. § 13, п. 3). В любом случае разъяснение единства математического описания моментов импульса используется, т. е. свойства орбитальных моментов переносятся на спиновые.

По спину уместно проведение семинарского занятия с выступлениями студентов.

**II.** При изучении материала студентам полезно контролировать усвоение знаний, отвечая на вопросы, выполняя задания и упражнения:

— В чем специфика квантово-механического момента импульса по сравнению с классическим? Законспектируйте в краткой форме основные сведения об операторах момента импульса и его собственных функциях. Назовите сохраняющиеся и имеющие определенное значение величины при движении частицы в кулоновском поле. Выделите основные этапы решения задачи об атоме водорода. Примените результаты решения для описания пространственной структуры атома. Сделайте рисунки электронных облаков ряда состояний атома водорода, соединяя в них радиальное и угловое распределения вероятности.

— Раскройте понятие о спине как совокупности определенных свойств элементарной частицы. Сопоставьте формулы спинового и орбитального механического моментов. Как связан магнитный спиновый момент с зарядом (для электрона)? Что такое гиromагнитное отношение и как его можно выразить через другие величины, характеризующие механические и магнитные свойства частицы? Выпишите и раскройте смысл различных конкретных наборов квантовых чисел электрона в атоме (например,  $(1,0, 0, 1/2)$ ,  $(2, 1, -1, -1/2)$  и т. д.). Выполните упражнения к главе.

#### Упражнение IV

1. Найдите выражения (10.3) операторов проекций момента импульса в сферических координатах.

Решение.

Воспользуемся выражением оператора  $\nabla$  в сферических координатах:

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

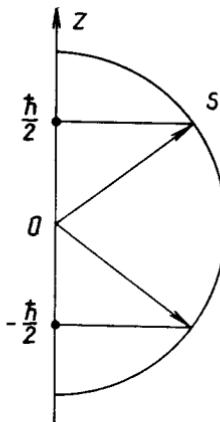


Рис. 13.1

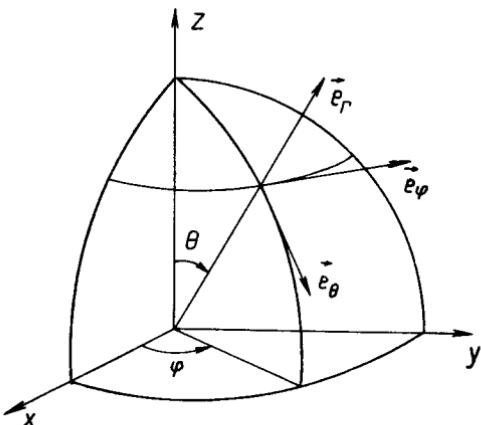


Рис. 13.2

У нас

$$\hat{\vec{L}} = -i\hbar [\vec{r} \nabla] = -i\hbar r [\vec{e}_r \nabla] = \\ = i\hbar \left\{ [\vec{e}_r \vec{e}_\theta] \frac{\partial}{\partial \theta} + [\vec{e}_r \vec{e}_\phi] \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right\} = -i\hbar \left\{ \vec{e}_\phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\vec{e}_\theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right\}$$

(рис. 13.2). Остается спроектировать вектор  $\hat{\vec{L}}$  на оси декартовых координат.

2. Используя результаты предыдущей задачи, найдите оператор  $\hat{L}^2$  в сферических координатах.

3. По формулам (10.8)...(10.9) найдите все сферические функции при  $l \leq 2$ .

4. Непосредственной подстановкой в уравнение (10.6) покажите, что функции (10.11) являются его решениями.

5. Прямым вычислением покажите, что функции (10.11) удовлетворяют условию нормировки (10.10).

6. Проверьте выполнение условий попарной ортогональности функций (10.11).

7. Выполните переход от уравнения (11.2) к уравнению (11.4).

8. Сделайте подстановку (11.13) в уравнение (11.4).

9. Сделайте зарисовку электронного облака для состояний:  $n=1$ ,  $l=0$ ,  $m=0$ ;  $n=2$ ,  $l=0$ ,  $m=0$ ;  $n=2$ ,  $l=1$ ,  $m=\pm 1$ .

10. Найдите радиальные волновые функции (11.11) с помощью формулы (11.9).

11. Покажите, что операторы  $\hat{L}^2$  и  $\hat{L}_z$  коммутируют.

Решение.

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \text{ и } [\hat{L}^2 \hat{L}_z] = [\hat{L}_z^2 \hat{L}_z] + [\hat{L}_y^2 \hat{L}_z] + [L_z^2 L_z].$$

Последнее слагаемое равно нулю, так как любой оператор всегда коммутирует сам с собой и с любой своей степенью. Для вычисления первых двух слагаемых используем равенство  $\hat{L}_x \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_x = -i\hbar L_y$ . Умножим его слева и справа на  $\hat{L}_x$ . Получим

$$\hat{L}_x \hat{L}_x \hat{L}_z - \hat{L}_x \hat{L}_z \hat{L}_x = -i\hbar \hat{L}_x \hat{L}_y$$

и

$$\hat{L}_x \hat{L}_z \hat{L}_x - \hat{L}_z \hat{L}_x \hat{L}_x = -i\hbar \hat{L}_y \hat{L}_x.$$

Складывая два последних выражения, имеем

$$[\hat{L}_x^2 \hat{L}_z] = -i\hbar [\hat{L}_x \hat{L}_y] = \hbar^2 \hat{L}_z.$$

Аналогичным приемом доказывается, что

$$[\hat{L}_y^2 \hat{L}_z] = -\hbar^2 \hat{L}_z.$$

Отсюда следует искомый результат.

12. Покажите, что для операторов  $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$  справедливы коммутационные соотношения

$$[\hat{L}_+ \hat{L}_-] = 2\hbar \hat{L}_z, [\hat{L}_z \hat{L}_\pm] = \pm \hbar \hat{L}_\pm.$$

13. Покажите, что

$$\widehat{L}_z \widehat{L}_{\pm} \psi_m = \hbar(m \pm 1) \widehat{L}_{\pm} \psi_m, \quad (1)$$

где  $\psi_m$  — собственная функция оператора  $\widehat{L}_z$ , принадлежащая собственному значению  $\hbar m$ . Заметим, что из (1) следует

$$\widehat{L}_{\pm} \psi_m = \psi_{m \pm 1}.$$

Указание. Воспользоваться результатами задачи 12.

14. Пользуясь данными задач 12 и 13, покажите, что из правил коммутации проекций момента импульса (10.2) вытекает условие квантования (10.7).

Решение.

$$L^2 - L_z^2 = L_x^2 + L_y^2 \geq 0.$$

Поэтому

$$-\sqrt{L^2} \leq L_z \leq \sqrt{L^2}.$$

Обозначим через  $\hbar l$  наибольшее возможное значение  $L_z$ . Пусть  $\psi_l$  — соответствующая собственная функция оператора  $\widehat{L}_z$ . Согласно данным задачи 13

$$\widehat{L}_+ \psi_l = \psi_{l+1}.$$

Очевидно,

$$\widehat{L}_+ \psi_l = 0,$$

так как состояний с  $m > l$  нет. Подействуем на обе части последнего равенства оператором  $\widehat{L}_-$ :

$$\widehat{L}_- \widehat{L}_+ \psi_l = 0.$$

Используя определения операторов  $\widehat{L}_-$  и  $\widehat{L}_+$  (см. задачу 12), имеем

$$(\widehat{L}^2 - \widehat{L}_z^2 - \widehat{L}_z) \psi_l = 0.$$

Функция  $\psi_l$  — собственная функция как для оператора  $\widehat{L}_z$ , так и для оператора  $\widehat{L}^2$ , так как они коммутируют. Поэтому получаем

$$(L^2 - \hbar^2 l^2 - \hbar l) \psi_l = 0.$$

Отсюда следует

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1).$$

15. Покажите, что операторы (13.10) являются самосопряженными.

16. Покажите, что операторы проекций спина (13.11) удовлетворяют условиям коммутации (13.1).

17. Вычислите оператор  $\widehat{S}^2$  через операторы проекций  $\widehat{S}_x$ ,  $\widehat{S}_y$  и  $\widehat{S}_z$ .

18. Покажите, что операторы  $\widehat{S}^2$  и  $\widehat{S}_z$  коммутируют.