

```
> restart;
```

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ
(В.М. ГАЛИЦКИЙ, Б.М. КОРНАКОВ, В.И. КОГАН.
ЗАДАЧИ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ)
Журавлев В.М.
Ульяновский государственный университет, 2020

ПРОИЗВОДНЫЕ ОТ ОПЕРАТОРОВ

```
> with(plots):  
with(plottools):
```

Формат графиков

```
> frm:=axes=boxed,gridlines=true,labeldirections=[horizontal,vertical],labelfont=[TIMES,BOLD,16],titlefont=[TIMES,BOLD,20],font=[TIMES,BOLD,20],symbol=solidcircle,symbolsize=18,legendstyle=[font=["TIMES",BOLD,18],location=bottom],size=[900,600];
```

```
frm := axes = boxed, gridlines = true, labeldirections = [horizontal, vertical], labelfont = [TIMES, BOLD, 16], titlefont = [TIMES, BOLD, 20], font = [TIMES, BOLD, 20], symbol = solidcircle, symbolsize = 18, legendstyle = [font = ["TIMES", BOLD, 18], location = bottom], size = [900, 600]
```

Нестационарное уравнение Шредингера

1. Нестационарное уравнение Шредингера в общем случае имеет такой вид:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi,$$

где $\hat{H}$ – оператор Гамильтона, а $U(x,t)$ – потенциальная энергия системы.

2. В одномерном случае:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + U(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x, t)$$

поэтому уравнение Шредингера имеет такой вид:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x, t) \right) \psi$$

В случае, если потенциальная энергия не зависит явно от t уравнение Шредингера можно решить в общем виде.

Пусть $U = U(x)$, тогда в уравнении Шредингера можно провести разделение переменных. Полагаем:

$\psi = C(t)\Psi(x)$. Подставляя это соотношение в уравнение, после разделения переменных находим:

$$i\hbar \frac{d}{dt} C = EC, \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x; E) + U(x, t) \Psi(x; E) = E \Psi(x; E).$$

Число E – является параметром разделения переменных. Можно видеть, что E

- это собственное значение оператора полной энергии, а $\Psi(x; E)$
- волновая функция стационарного состояния с фиксированной энергией.

Решение для коэффициента $C(t)$ имеет вид:

$$C(t) = C_0(E) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

Окончательно, полное решение задачи имеет такой вид:

$$\psi = \sum_E C_0(E) e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \Psi(x; E)$$

Сумма берется по всем допустимым энергиям оператора Гамильтона, как в дискретной так и в непрерывной части спектра.

Из этого решения следует, что если начальное состояние отличается от состояния с фиксированным значением энергии,

волновая функция системы будет меняться со временем в соответствии с общим решением для ψ .

Если начальное состояние системы является состоянием с фиксированной энергией E ,

то волновая функция такой системы будет иметь вид:

$$\psi = C_0(E) e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \Psi(x; E)$$

Квадрат модуля этой функции, представляющий собой плотность вероятности найти частицу в точке с координатой x , не зависит от времени:

$$|\psi|^2 = \left| C_0(E) e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \Psi(x; E) \right|^2 = |C_0(E)|^2 |\Psi(x; E)|^2$$

Напомним, что коэффициент $|C_0(E)|^2$ находится из условия нормировки.

Поэтому состояния с фиксированной энергией называют стационарными состояниями системы.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПРОИЗВОДНОЙ ОТ ОПЕРАТОРА

Понятие полной производной от оператора появляется в задаче вычисления зависимости от времени средних значений динамических переменных квантовой системы, если ее волновая функция отличается от состояния с фиксированной энергией. Общее выражение для среднего значения динамической переменной Q , изображаемой в квантовой механике оператором $\hat{Q}$, в состоянии ψ имеет такой вид:

$$\bar{Q} = \int_{-\infty}^{\infty} (\psi)^* \hat{Q} \psi dx.$$

Если волновая функция ψ зависит от времени, то от времени зависит и среднее значение $\bar{Q}$. Продифференцируем $\bar{Q}$ по t . В результате получим:

$$\frac{d}{dt} \bar{Q} = \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} (\psi)^* \hat{Q} \psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\left(\frac{\partial}{\partial t} \psi \right)^* \hat{Q} \psi + (\psi)^* \hat{Q} \frac{\partial}{\partial t} \psi + (\psi)^* \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{Q} \right) \psi \right] dx.$$

Подставим в это соотношение производные по времени от волновой функции из уравнения Шредингера. В результате находим:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \bar{Q} &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\left(\frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi \right)^* \hat{Q} \psi + (\psi)^* \hat{Q} \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi + (\psi)^* \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{Q} \right) \psi \right] dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[(\psi)^* \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{Q} - \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{Q}] \right) \psi \right] dx \end{aligned}$$

По определению оператор в круглых скобках – это оператор полной производной оператора по времени:

$$\frac{d}{dt} \hat{Q} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial}{\partial t} \hat{Q} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{Q}].$$

Тогда имеем следующее соотношение:

$$\frac{d}{dt} \bar{Q} = \int_{-\infty}^{\infty} \left[(\psi)^* \left(\frac{d}{dt} \hat{Q} \right) \psi \right] dx$$

Решение задач

Задача 7.10 ГКК

7.10. Состояние частицы, находящейся в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме ширины a ($0 < x < a$), в начальный момент времени имеет вид

$$\Psi(x, t=0) = A \sin^3 \frac{\pi x}{a}.$$

Найти волновую функцию в произвольный момент времени. Показать, что через некоторое время T частица возвращается в исходное состояние.

Стационарные состояния квантовой частицы в бесконечно глубокой яме имеют волновые функции:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin\left(\frac{\pi n}{a} x\right)$$

и собственные энергии:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi n}{a} \right)^2$$

Согласно условию задачи начальная волновая функция системы имеет такой вид:

$$\Psi(x, 0) = A \left(\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \right)^3.$$

Воспользуемся двумя тригонометрическими тождествами:

$$(\sin(\alpha))^3 = \frac{1}{2} (1 - \cos(2\alpha)) \sin(\alpha) = \frac{1}{2} \sin(\alpha) - \frac{1}{4} \sin(3\alpha) + \frac{1}{4} \sin(\alpha) = \frac{3}{4} \sin(\alpha) - \frac{1}{4} \sin(3\alpha)$$

$$(\cos(\alpha))^3 = \frac{1}{2} (1 + \cos(2\alpha)) \cos(\alpha) = \frac{1}{2} \cos(\alpha) + \frac{1}{4} \cos(3\alpha) + \frac{1}{4} \cos(\alpha) = \frac{3}{4} \cos(\alpha) + \frac{1}{4} \cos(3\alpha)$$

Проверяем эти соотношения с помощью Maple

```
> combine[trig] (sin(alpha)^3);
```

$$\frac{3}{4} \sin(\alpha) - \frac{1}{4} \sin(3\alpha) \quad (2)$$

```
> combine[trig] (cos(alpha)^3);
```

$$\frac{1}{4} \cos(3\alpha) + \frac{3}{4} \cos(\alpha) \quad (3)$$

Первым делом необходимо нормировать волновую функцию. Имеем :

$$\begin{aligned}
 1 &= A^2 \int_0^a \Psi(x)^* \Psi(x) dx = A^2 \int_0^a \left(\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) \right)^6 dx = A^2 \int_0^a \left(\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) \right)^2 dx = \\
 &= \frac{A^2}{8} \int_0^a \left(1 - \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) \right)^3 dx = \frac{A^2}{8} \int_0^a \left[1 - 3\cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) + 3\left(\cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right)\right)^2 - \left(\cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right)\right)^3 \right] dx = \\
 &= \frac{A^2}{8}a + \frac{A^2}{8} \int_0^a \left[3\left(\cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right)\right)^2 - \left(\cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right)\right)^3 \right] dx = \\
 &= \frac{A^2}{8}a + \frac{A^2}{8} \int_0^a \left[\frac{3}{2} \left(1 + \cos\left(\frac{4\pi}{a}x\right) \right) - \left(\cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right)\right)^3 \right] dx
 \end{aligned}$$

Используем тригонометрические тождества:

$$\begin{aligned}
 1 &= \frac{A^2}{8}a + \frac{3A^2}{16}a - \frac{A^2}{8} \int_0^a \left(\cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) \right)^3 dx = \frac{A^2}{8}a + \frac{A^2}{16}a - \frac{A^2}{32} \int_0^a \left(\cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) + 3\cos\left(\frac{6\pi}{a}x\right) \right) dx = \\
 1 &= \frac{A^2}{8}a + \frac{3A^2}{16}a - \frac{5A^2}{16}a \\
 \text{Отсюда : } A &= 4 \sqrt{\frac{1}{5a}}
 \end{aligned}$$

Проверяем вычисление интеграла :

> A^2*int(sin(Pi*x/a)^6,x=0..a);

$$\frac{5}{16} A^2 a$$

(4)

Согласно тождеству, для начальной функции имеем:

$$\begin{aligned}
 \Psi(x, 0) &= A \left(\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) \right)^3 = 4 \sqrt{\frac{1}{5a}} \left(\frac{3}{4} \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) - \frac{1}{4} \sin\left(\frac{3\pi}{a}x\right) \right) = \\
 &= \sqrt{\frac{1}{10}} \left(3 \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) - \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{3\pi}{a}x\right) \right) = \sqrt{\frac{1}{10}} (3\psi_1(x) - \psi_3(x))
 \end{aligned}$$

Отсюда следует, что вероятность обнаружить частицу

$$\text{в состоянии } \psi_1(x) \text{ с энергией } E_1 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a} \right)^2 \text{ равна } P_1 = \frac{9}{10},$$

$$\text{а в состоянии } \psi_3(x) \text{ с энергией } E_3 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3\pi}{a} \right)^2 \text{ равна } P_3 = \frac{1}{10}. \text{ В сумме } 1.$$

Согласно основным постулатам функции $\psi_n(x)$ и $\psi_m(x)$ взаимно ортогональны.

Общее представление для волновой функции нестационарного состояния имеет вид (смотрите выше) :

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \psi_n(x).$$

По условию задачи в разложении функции в начальный момент времени имеются только два слагаемых этой суммы с $n = 1$ и $n = 3$. Поэтому волновая функция системы имеет такой вид :

$$\Psi(x, t) = \sqrt{\frac{1}{10}} \left(3\psi_1(x) e^{\frac{i\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a} \right)^2 t} - \psi_3(x) e^{\frac{i\hbar^2}{2m} \left(\frac{3\pi}{a} \right)^2 t} \right)$$

Построим анимацию динамики квадрата модуля волновой функции

> Phi := (x, t, a) -> sqrt(1/10) * (3*sin(Pi*x/a)*exp(I*(Pi^2/a^2)*t) - sin(3*Pi*x/a)*exp(I*(9*Pi^2/a^2)*t));

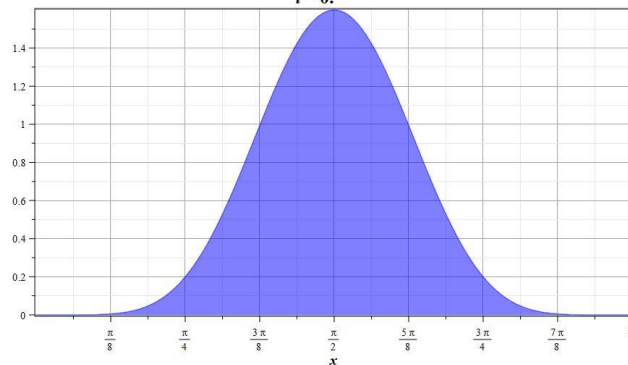
$$\Phi := (x, t, a) \rightarrow \sqrt{\frac{1}{10}} \left(3 \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{\frac{1\pi^2 t}{a^2}} - \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) e^{\frac{91\pi^2 t}{a^2}} \right)$$

(5)

Для удобства полагаем $\frac{\hbar^2}{2m} = 1$.

```
> animate(plot, [Phi(x,t,Pi)*Phi(x,-t,Pi), x=0..Pi, frm, title="Динамика плотности вероятности\n найти частицу\n внутри бесконечно глубокой ямы", color=blue, transparency=0.5, filled=true], t=0..2*Pi, frames=50, size=[900, 600]);
```

Динамика плотности вероятности
найти частицу внутри бесконечно глубокой ямы
 $t = 0.$



Задачи

Задача 1.

Найти оператор скорости для одномерной частицы в потенциальной яме

Решение задачи

Оператор Гамильтона частицы в потенциальной яме равен:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + U(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)$$

Согласно общему правилу оператор скорости $\hat{v}$ равен :

$$\hat{v} = \frac{d}{dt} \hat{x} = \frac{\partial}{\partial t} \hat{x} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}].$$

Оператор координаты явно от времени не зависит, поэтому $\frac{\partial}{\partial t} \hat{x} = 0$. Отсюда :

$$\hat{v} = \frac{d}{dt} \hat{x} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}]$$

Вычислим коммутатор операторов $\hat{H}$ и $\hat{x}$. Пусть ψ - произвольная волновая функция. Тогда :

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{x}] \psi &= \hat{H} \hat{x} \psi - \hat{x} \hat{H} \psi = \left(\frac{1}{2m} \hat{p}^2 + U(x) \right) \hat{x} \psi - \hat{x} \left(\frac{1}{2m} \hat{p}^2 + U(x) \right) \psi = \\ &= \frac{1}{2m} [\hat{p}^2, \hat{x}] \psi + [U(x), \hat{x}] \psi \end{aligned}$$

Вычисляем коммутаторы по отдельности. Любая функция оператора коммутирует с самим оператором, поэтому :

$$[U(x), \hat{x}] \psi = 0$$

Для вычисления $[\hat{p}^2, \hat{x}]$ воспользуемся тождеством :

$$[\hat{A} \hat{B}, \hat{C}] = \hat{A} \hat{B} \hat{C} - \hat{C} \hat{A} \hat{B} = \hat{A} \hat{B} \hat{C} - \hat{A} \hat{C} \hat{B} + \hat{A} \hat{C} \hat{B} - \hat{C} \hat{A} \hat{B} = \hat{A} [\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}] \hat{B}$$

Это позволяет рассчитать сложный коммутатор с помощью более простого. Именно :

$$[\hat{p}^2, \hat{x}] = \hat{p} [\hat{p}, \hat{x}] + [\hat{p}, \hat{x}] \hat{p}$$

Рассчитываем коммутатор $[\hat{p}, \hat{x}]$:

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

В операторной форме записи имеем :

$$[\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar \hat{1}$$

Отсюда находим :

$$[\hat{p}^2, \hat{x}] = \hat{p} [\hat{p}, \hat{x}] + [\hat{p}, \hat{x}] \hat{p} = -2i\hbar \hat{p}$$

В результате :

$$\hat{v} = \frac{d}{dt} \hat{x} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}] = \frac{i}{2m\hbar} [\hat{p}^2, \hat{x}] = \frac{i}{2m\hbar} (-2i\hbar \hat{p}) = \frac{1}{m} \hat{p}$$

Оператор скорости равен оператору импульса, деленному на массу, что внешне повторяет классическую механику.

Задача 2

Найти оператор ускорения для одномерной частицы в потенциальной яме

Решение задачи

Оператор Гамильтона частицы в потенциальной яме равен:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + U(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)$$

Согласно общему правилу, оператор ускорения $\hat{a}$ равен:

$$\hat{a} = \frac{d}{dt} \hat{v} = \frac{\partial}{\partial t} \hat{v} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{v}].$$

Оператор скорости явно от времени не зависит, поэтому $\frac{\partial}{\partial t} \hat{v} = \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial t} \hat{p} = 0$. Отсюда:

$$\hat{a} = \frac{d}{dt} \hat{v} = \frac{i}{m\hbar} [\hat{H}, \hat{p}]$$

Вычислим коммутатор операторов $\hat{H}$ и $\hat{p}$. Пусть ψ – произвольная волновая функция. Тогда:

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{p}] \psi &= \hat{H} \hat{p} \psi - \hat{p} \hat{H} \psi = \left(\frac{1}{2m} \hat{p}^2 + U(x) \right) \hat{p} \psi - \hat{p} \left(\frac{1}{2m} \hat{p}^2 + U(x) \right) \psi = \\ &= \frac{1}{2m} [\hat{p}^2, \hat{p}] \psi + [U(x), \hat{p}] \psi = [U(x), \hat{p}] \psi \end{aligned}$$

Вычислим коммутатор:

$$[U(x), \hat{p}] \psi = U(x) \hat{p} \psi - \hat{p} U(x) \psi = -i\hbar U(x) \frac{\partial}{\partial x} \psi + i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (U(x) \psi) = i\hbar \frac{\partial U(x)}{\partial x} \psi$$

Отсюда получаем:

$$\hat{a} = \frac{d}{dt} \hat{v} = \frac{i}{m\hbar} [\hat{H}, \hat{p}] = \frac{i}{m\hbar} i\hbar \frac{\partial U(x)}{\partial x} = -\frac{1}{m} \frac{\partial U(x)}{\partial x} = \frac{1}{m} F(x).$$

Величина

$$F(x) = -\frac{\partial U(x)}{\partial x}$$

в классической механике является силой, действующей на частицу. Таким образом, оператор ускорения в квантовой механике есть сила, деленная на массу частицы.

Это означает, что в квантовой механике именно в операторном виде выполняется второй закон Ньютона.

Соотношения:

$$\frac{d}{dt} \hat{v} = \frac{i}{m\hbar} [\hat{H}, \hat{p}],$$

$$\frac{d}{dt} \hat{x} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}]$$

можно рассматривать как квантовые уравнения Гамильтона, в которые вместо классических скобок Пуассона входят квантовые скобки Пуассона, имеющие вид коммутатора заданного оператора с оператором Гамильтона!

Средняя сила, действующая на частицу

Согласно теореме Зоммерфельда (см. учебники), в физических приборах мы наблюдаем движение квантовых частиц в среднем.

Поэтому для наблюдений важно рассчитать среднюю скорость частицы и среднее ускорение.

Однако в этом случае среднее ускорение уже не будет подчиняться классическому уравнению Ньютона.

К величине силы будут добавляться квантовые поправки. Вычислим эти поправки. Пусть ψ волновая функция квантового состояния, в котором мы хотим вычислить ускорение частицы. Тогда:

$$\bar{a} = \langle \psi, \hat{a} \psi \rangle = \langle \psi, \frac{i}{m\hbar} [\hat{H}, \hat{p}] \psi \rangle = -\frac{1}{m} \langle \psi, \frac{\partial U(x)}{\partial x} \psi \rangle = \frac{1}{m} \langle \psi, F(x) \psi \rangle = \frac{1}{m} \bar{F}$$

Рассчитаем среднюю силу как функцию средней координаты частицы:

$$\bar{F}(\bar{x}) = - \int_{-\infty}^{\infty} \left(\psi(x; E) \right)^* \frac{\partial U(x)}{\partial x} \psi(x; E) dx.$$

Пусть

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\psi(x; E) \right)^* x \psi(x; E) dx$$

– средняя координата частицы в некотором состоянии $\psi(x)$. Разложим функцию $U(x)$ в ряд Тейлора в точке $x = \bar{x}$. Имеем:

$$U(x) = U(\bar{x}) + \frac{\partial U(\bar{x})}{\partial x} (x - \bar{x}) + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 U(\bar{x})}{\partial x^2} (x - \bar{x})^2 + \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 U(\bar{x})}{\partial x^3} (x - \bar{x})^3 + \dots$$

Отсюда:

$$\frac{\partial U(x)}{\partial x} = \frac{\partial U(\bar{x})}{\partial x} + \frac{1}{1!} \frac{\partial^2 U(\bar{x})}{\partial x^2} (x - \bar{x}) + \frac{1}{2!} \frac{\partial^3 U(\bar{x})}{\partial x^3} (x - \bar{x})^2 + \dots$$

Подставим это разложение в выражение для средней силы. В результате находим:

$$\bar{F}(\bar{x}) = - \int_{-\infty}^{\infty} \left(\psi(x; E) \right)^* \frac{\partial U(x)}{\partial x} \psi(x; E) dx =$$

$$= - \int_{-\infty}^{\infty} \left(\Psi(x; E) \right)^* \left(\frac{\partial U(X)}{\partial X} + \frac{1}{1!} \frac{\partial^2 U(X)}{\partial X^2} (x-X) + \frac{1}{2!} \frac{\partial^3 U(X)}{\partial X^3} (x-X)^2 + \dots \right) \Psi(x; E) dx =$$

$$= - \frac{\partial U(X)}{\partial X} - \frac{1}{2!} \frac{\partial^3 U(X)}{\partial X^3} \sigma_X^2 + \dots = - \frac{\partial}{\partial X} \left(U(X) + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 U(X)}{\partial X^2} \sigma_X^2 + \dots \right) = - \frac{\partial}{\partial X} U_s(X)$$

Здесь

$$U_s(X) = U(X) + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 U(X)}{\partial X^2} \sigma_X^2 + \dots$$

– средняя потенциальная энергия в точке X . Здесь и далее использованы соотношения :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(\Psi(x, y, z; E) \right)^* (x-X) \Psi(x, y, z; E) dx = 0,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(\Psi(x, y, z; E) \right)^* (y-Y) \Psi(x, y, z; E) dx = 0,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(\Psi(x, y, z; E) \right)^* (x-X)^2 \Psi(x, y, z; E) dx = \sigma_X^2 = Dx$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(\Psi(x, y, z; E) \right)^* (y-Y)^2 \Psi(x, y, z; E) dx = \sigma_Y^2 = Dy$$

Отсюда видно, что средняя сила является потенциальной со средним потенциалом $U_s(X)$, отличающимся от исходного потенциала $U(X)$ исходной классической задачи.

В случае частицы, движущейся на плоскости или в пространстве в потенциальном поле сил, общее выражение для компонентов скорости и ускорения будет выглядеть так :

$$\hat{v}_x = \frac{d}{dt} \hat{x} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}] = \frac{1}{m} \hat{p}_x$$

$$\hat{v}_y = \frac{d}{dt} \hat{y} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{y}] = \frac{i}{2m\hbar} [\hat{p}^2, \hat{y}] = \frac{i}{2m\hbar} (-2i\hbar \hat{p}_y) = \frac{1}{m} \hat{p}_y$$

$$\hat{v}_z = \frac{d}{dt} \hat{z} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{z}] = \frac{i}{2m\hbar} [\hat{p}^2, \hat{z}] = \frac{i}{2m\hbar} (-2i\hbar \hat{p}_z) = \frac{1}{m} \hat{p}_z$$

$$\hat{a}_x = \frac{i}{m\hbar} [\hat{H}, \hat{p}_x] = -\frac{1}{m} \frac{\partial U(x, y, z)}{\partial x} = \frac{1}{m} F_x(x, y, z),$$

$$\hat{a}_y = \frac{i}{m\hbar} [\hat{H}, \hat{p}_y] = -\frac{1}{m} \frac{\partial U(x, y, z)}{\partial y} = \frac{1}{m} F_y(x, y, z).$$

$$\hat{a}_z = \frac{i}{m\hbar} [\hat{H}, \hat{p}_z] = -\frac{1}{m} \frac{\partial U(x, y, z)}{\partial z} = \frac{1}{m} F_z(x, y, z).$$

Пример. Рассмотрим квантовую частицу массой m в потенциальном поле сил с потенциальной энергией:

$$U(x, y) = \alpha(x^2 + y^2) + \beta(x^3 + y^3)$$

Сила, действующая на такую частицу, имеет компоненты:

$$F_x(x, y) = -\frac{\partial U(x, y)}{\partial x} = -2\alpha x - 3\beta x^2$$

$$F_y(x, y) = -\frac{\partial U(x, y)}{\partial y} = -2\alpha y - 3\beta y^2$$

Средняя потенциальная энергия равна:

$$U_s(X, Y) = \alpha(X^2 + Y^2) + \beta(X^3 + Y^3) + 6\beta(X\sigma_X^2 + Y\sigma_Y^2).$$

Отсюда вычисляем компоненты средней силы :

$$F_{Q,X}(X, Y) = -\frac{\partial}{\partial X} U_s(X, Y) = -2\alpha X - 3\beta X^2 + 6\beta \sigma_X^2$$

$$F_{Q,Y}(X, Y) = -\frac{\partial}{\partial Y} U_s(X, Y) = -2\alpha Y - 3\beta Y^2 + 6\beta \sigma_Y^2$$

Эти соотношения показывают, что в квантовом случае к классической силе, вычисленной в точке (X, Y)

добавляется чисто квантовая добавка в виде постоянной силы с компонентами:

$$F_{q,X}(X, Y) = 6\beta\sigma_X^2, \quad F_{q,Y}(X, Y) = 6\beta\sigma_Y^2$$

Такие силы важны для описания микрообъектов.

ЗАДАЧИ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОГО РЕШЕНИЯ

ЗАДАЧА 7.11 ГКК

7.11. Как изменяется во времени состояние плоского ротатора, если в начальный момент ($t=0$) оно описывалось волновой функцией

$$\Psi(\varphi, t=0) = A \sin^2 \varphi$$

ЗАДАЧА 7.13 ГКК

7.13. Состояние свободной частицы в момент времени $t=0$ описывается волновой функцией вида

$$\Psi(x, t=0) = A \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2} + \frac{im_0 x}{\hbar}\right).$$

Найти изменение состояния частицы во времени и следующие средние: $x(t)$, $p(t)$, $(\Delta x(t))^2$, $(\Delta p(t))^2$ (см. также задачи 7.19 и 7.36).

ЗАДАЧА 7.16 ГКК

7.16. Состояние частицы в поле δ -функциональной ямы (см. 2.11) в начальный момент времени описывается волновой функцией

$$\Psi(x, t=0) = A \exp(-\beta|x|), \quad \beta > 0.$$

Какова вероятность обнаружить частицу на отрезке $(x, x+dx)$ при $t \rightarrow \infty$? Найти значение интеграла

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t=\infty)|^2 dx$$

и сравнить его с первоначальным значением. Объяснить полученный результат.

Задача 1.

Вычислите полную производную от операторов

$\hat{x}$, $\hat{p}$ и $\hat{\hat{x}}$ для системы с оператором Гамильтона частицы в потенциальном поле сил.

Задача 2.

Вычислите полную производную от оператора проекции орбитального момента на ось z

$$\hat{L}_z = [\hat{x} \times \hat{p}]_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = (\hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x)$$

для системы с оператором Гамильтона частицы в двумерном потенциальном поле сил $U(x, y)$:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + U(x, y) = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2) + U(x, y) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + U(x, y)$$

Задача 3.

Вычислите среднюю силу, действующую на частицу в поле с потенциальной энергией

$$a) \quad U(x, y) = -\frac{1}{x^2 + y^2}, \quad b) \quad U(x, y) = -\frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2}}$$

Найдите первую квантовую поправку к исходному потенциалу как функции средней координаты.