№ 1480

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
ИНСТИТУТ СТАЛИ и СПЛАВОВ
Технологический университет
МИСиС

Ю.Х. Векилов, Ю.М. Кузьмин, С.И. Мухин

# КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Учебное пособие

МОСКВА 2001

№ 1480

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
ИНСТИТУТ СТАЛИ и СПЛАВОВ
Технологический университет
МИСиС

Кафедра теоретической физики

**Ю.Х. Векилов, Ю.М. Кузьмин, С.И. Мухин**

# КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

**Учебное пособие**
для практических занятий
студентов специальности 1105

Рекомендовано редакционно-издательским
советом института в качестве учебного пособия

МОСКВА 2001

УДК 530.145.6
В 26

В 26 *Векилов Ю.Х., Кузьмин Ю.М., Мухин С.И.* Квантовая механика: Учеб. пособие. – М.: МИСиС, 2001.– 126 с.

В предлагаемое третье дополненное издание пособия по квантовой механике добавлены три новые раздела, обновлен и дополнен набор задач. Пособие состоит из восьми разделов: волновые пакеты; одномерные задачи квантовой механики; операторы, теория представлений, матрицы; движение в центральном поле и в поле с аксиальной симметрией; теория возмущений; вариационный метод; тождественность частиц; теория рассеяния в борновском приближении.

# ОГЛАВЛЕНИЕ

# 1. ВОЛНЫ ДЕ БРОЙЛЯ. ВОЛНОВЫЕ ПАКЕТЫ

## 1.1. Теоретическое введение

Гипотеза де Бройля исходит из сходства микрочастиц со светом: подобно свету микрочастицы обладают и корпускулярными и волновыми свойствами. Параметры волнового процесса, связанного с движением микрочастицы, определяются по динамическим переменным частицы: энергии $\varepsilon$ и импульсу $\vec{p}$. Связь между волновыми и корпускулярными характеристиками описывается уравнениями:

$$\varepsilon = \hbar\,\omega\,; \qquad \vec{p} = \hbar\,\vec{k}\,;$$

здесь $\hbar = h/2\pi$ ($h$ – постоянная Планка);

$\omega$ – круговая частота волны;

$k = 2\pi/\lambda$ – волновой вектор волны.

Для описания движения свободной микрочастицы, обладающей энергией $\varepsilon = m_0\,c^2 + \dfrac{p^2}{2\,m}$ и импульсом $\vec{p}$ можно воспользоваться выражением для плоской монохроматической волны (волны де Бройля) $\psi\,(x,t) = A\,e^{ikx - i\omega t}$. Однако, поскольку плоская волна распределена по всему пространству, она не может быть использована для описания движения частицы с импульсом $\vec{p} = \hbar\,\vec{k}$, локализованной в узкой области.

Чтобы получать волну, которая ограничена определенной областью пространства, нужно составить группу волн (волновой пакет), образуемую различными волновыми векторами. Фазы и амплитуды этих волн выбрать таким образом, чтобы при их интерференции волны усиливали друг друга в малой области пространства, вне которой результирующая амплитуда их быстро спадала бы до нуля из-за интерференции:

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} f(k)\,e^{ikx-i\omega(k)t}\,dk\ ,$$

где Фурье-образ

$$f(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x,0)\,e^{ikx}\,dx\,.$$

Выбор функции $f(k)$ определяет вид волновой функции $\psi$. Отметим, что Фурье-образ гауссовой функции также гауссовая функция.

Первоначальные предположения о том, что волна де Бройля есть материальный процесс, описывающий природу частиц, оказалось несостоятельным. Фазовая скорость волны больше скорости света, а волновой пакет, описывающий локализованную частицу со временем расплывается в пространстве из-за дисперсии.

Максом Борном была дана правильная, а именно статистическая интерпретация волн де Бройля: физический смысл имеет не сама волновая функция $\psi(x,t)$, а квадрат ее модуля $|\psi|^2=\psi\cdot\psi^*$, характеризующий плотность вероятности нахождения частицы в точке в момент $t$. Таким образом, волны де Бройля – это волны вероятности, а не материальные волны.

## 1.2. Задачи и контрольные вопросы

**Задача 1.1.** Построить волновую функцию $\psi(x)$ (Фурье-преобразование), если заданы волновые пакеты в $k$-пространстве с различными $f(k)$ (Фурье-образ).

**а)** $f(k)=\exp\left[-\dfrac{(k-k_0)^2}{2(\Delta k)^2}\right]$ – гауссов волновой пакет.

***Решение***

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} f(k)\,e^{ikx}\,dk=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(k-k_0)^2}{2(\Delta k)^2}+ikx}\,dk=$$

$$= e^{i k_0 x - \frac{x^2 (\Delta k)^2}{2}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(k-k_0)^2}{2(\Delta k)^2} + i(k-k_0)x + \frac{x^2(\Delta k)^2}{2}} \, dk =$$

$$= \sqrt{2\pi\,\Delta k}\ \exp\left[ i\,k_0\,x - \frac{1}{2}\,x^2\,(\Delta k)^2 \right].$$

Результирующий пакет гауссовой формы имеет максимум при $x = 0$ и становится малым при больших $x$ (рис. 1).

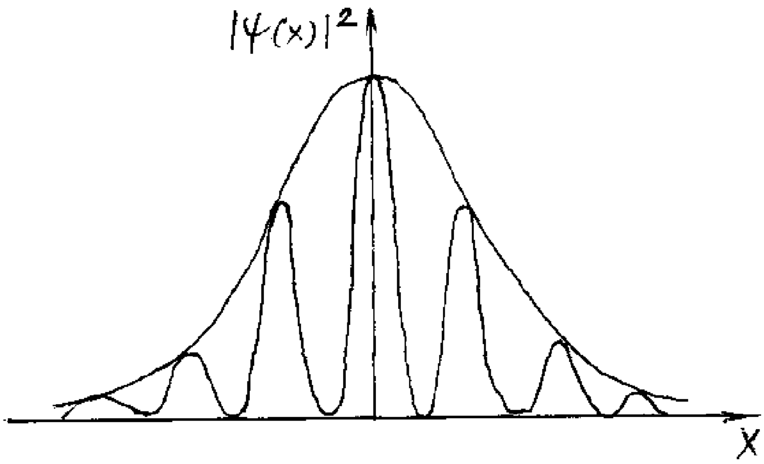


Рис. 1.

**б)** $f\,(k) = A = \text{const}$ в интервале от $k_0 - \Delta\,k$ до $k_0 + \Delta\,k$, $\Delta\,k << k_0$ (рис. 2).

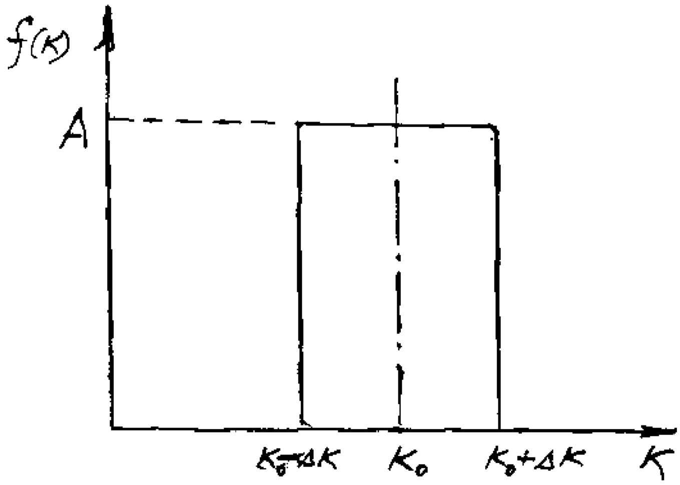


Рис. 2.

***Решение***

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(k)\, e^{ik(x-x_0)}\, dk = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} e^{ik(x-x_0)}\, dk =$$

$$= \frac{2A}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sin \Delta k\,(x-x_0)}{x-x_0} e^{ik_0(x-x_0)} \equiv B(x)\, e^{ik_0(x-x_0)},$$

где $B(x)$ – амплитуда пакета достигает максимума в точке $x = x_0$ (рис. 3).

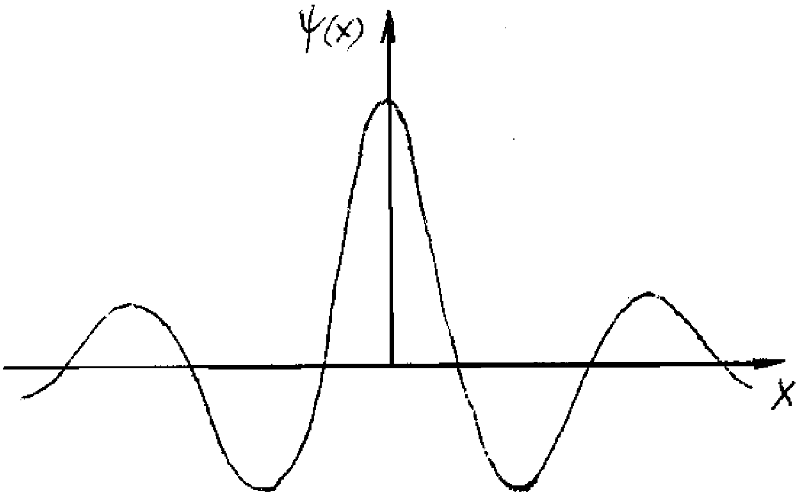


Рис. 3.

Так как эта функция быстро спадает до нуля при $\Delta x > \dfrac{1}{\Delta k}$, то отсюда следует, что произведение ширины пакета в $k$-пространстве на ширину в $x$-пространстве порядка единицы, т.е $\Delta k\,\Delta x > 1$.

**Задача 1.2.** Исследовать движение волнового пакета $f(k) = f(k_0) = A$, $\Delta k << k_0$ в пространстве. Дисперсию не учитывать.

***Решение***

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(k)\, e^{ikx - i\omega_k t}\, dk = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} e^{ikx - i\omega_k t}\, dk .$$

Разлагая частоту $\omega_k$ в ряд по степеням $k - k_0$, получим

$$\omega_k = \omega_{k_0} + \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0} (k - k_0) + \ldots ,$$

и вводя новую переменную $\xi = k - k_0$, находим

$$\psi(x,t)=\frac{A}{\sqrt{2\pi}}e^{ik_0x-i\omega_{k_0}t}\int\limits_{-\Delta k}^{\Delta k}e^{i\xi\left[x-\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0}t\right]}d\xi .$$

После интегрирования, получим

$$\psi(x,t)=\frac{2A}{\sqrt{2\pi}}\frac{\sin\left\{\left[x-\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0}t\right]\Delta k\right\}}{x-\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0}t}e^{ik_0x-i\omega_{k_0}t}\equiv B(x,t)\,e^{ik_0x-i\omega_{k_0}t} .$$

Функцию $B(x,t)$ можно рассматривать как амплитуду почти монохроматической волны, а $(k_0x-\omega_{k_0}t)$ – как ее фазу. Вид функции $\psi(x,t)$ показан на рис. 3. Своего наибольшего значения амплитуда $B(x,t)$ достигает в точке $x_{\max}=\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0}t$ . Отсюда следует, что центр группы волн движется с групповой скоростью, равной $\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0}$ .

**Задача 1.3.** Найти групповую скорость $v_{гр}$ движения и закон расплывания $\Delta x(t)$ волнового пакета $\psi(x,0)=\sqrt{\frac{\pi}{(\Delta x_0)^2}}\exp\left[-\frac{x^2}{2(\Delta x_0)^2}\right]$, имеющего в момент $t=0$ гауссову форму.

***Решение***

Волновой пакет в момент $t$ может быть записан в виде

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int\limits_{-\infty}^{\infty}f(k)\,e^{ikx-i\omega(k)t}dk ,$$

где $f(k)$ – Фурье-образ волнового пакета не зависит от времени и может быть найден по волновому пакету при $t=0$ (см. задачу 1.1,а), т.е.

$$f(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \psi(x, 0)\, e^{-ikx}\, dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{\pi}{(\Delta x_0)^2}}\; e^{-\frac{x^2}{2(\Delta x_0)^2} - i(k-k_0)x}\, dx\,.$$

Показатель экспоненты правой подынтегральной функции приведем к полному квадрату, тогда интеграл сведется к интегралу Пуассона. Для этого примем $\dfrac{1}{2(\Delta x_0)^2} = \alpha\,;\quad i(k - k_0) = \beta$

Тогда

$$-\alpha x^2 - \beta x = -\alpha\left(x^2 + \frac{\beta}{\alpha}x + \frac{\beta^2}{4\alpha^2}\right) + \frac{\beta^2}{4\alpha} = -\alpha\left(x + \frac{\beta}{2\alpha}\right)^2 + \frac{\beta^2}{4\alpha}.$$

Интегрируя и переходя к старым обозначениям, получаем

$$f(k) = \sqrt{\pi}\,\exp\left[-\frac{1}{2}(k - k_0)^2(\Delta x_0)^2\right].$$

Подставляя $f(k)$ в формулу для $\psi(x, t)$, получаем

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\pi}\,\exp\left[-\frac{1}{2}(k - k_0)^2(\Delta x_0)^2 + \right.$$

$$\left. + i(k - k_0)x + i k_0 x - \frac{i\hbar k^2 t}{2m}\right]dk\,,$$

здесь мы учли соотношение

$$\omega = \frac{p^2}{\hbar\, 2m} = \frac{\hbar k^2}{2m}.$$

Повторим процедуру приведения показателя экспоненты к полному квадрату:

$$-\frac{1}{2}\left[(\Delta x_0)^2 + \frac{i\hbar t}{m}\right](k - k_0)^2 + i\left(x - \frac{\hbar k_0 t}{m}\right)(k - k_0) + i k_0 x - \frac{i\hbar k_0^{\,2}}{2m}t \equiv$$

$$\equiv -a\,\xi^2 + b\,\xi + c = -a\left(\xi - \frac{b}{2\,a}\right)^2 + \frac{b^2}{4\,a} + c\,,$$

здесь

$$\xi = k - k_0\ ; \quad a = \frac{1}{2}\left[\,(\Delta\,x_0)^2 + \frac{i\,\hbar\,t}{m}\right]; \quad b = i\,(x - v\,t)\ ;$$

$$c = i\,k_0\ x - i\,\omega_{k_0} t\ ; \quad v = \frac{\hbar\,k_0}{m}\ ; \quad \omega_{k_0} = \frac{\hbar\,k_0}{2\,m}\,.$$

В результате интегрирования получаем

$$\psi\,(x,t) = \sqrt{\frac{\pi}{(\Delta\,x_0)^2 + \dfrac{i\,\hbar\,t}{m}}}\ \exp\left[-\frac{(x - v\,t)^2}{2\left[(\Delta\,x_0)^2 + \dfrac{i\,\hbar\,t}{m}\right]} + i\,k_0\ x - i\,\omega_{k_0} t\right] \equiv$$

$$\equiv B\,(x,t)\exp\left[\,i\,k_0\ x - i\,\omega_{k_0}\ t\,\right].$$

Модуляция амплитуды пакета определяется множителем

$$\exp\left[-\frac{(x - v\,t)^2}{2\left[(\Delta\,x_0)^2 + \dfrac{i\,\hbar\,t}{m}\right]}\right] =$$

$$= \exp\left[-\frac{(x - v\,t)^2}{2\,(\Delta\,x)^2}\right]\exp\left[\frac{i\,\hbar\,t}{2\,m}\frac{(x - v\,t)^2}{\left[(\Delta\,x_0)^4 + \dfrac{\hbar^2\,t^2}{m^2}\right]}\right],$$

где

$$(\Delta\,x)^2 = (\Delta\,x_0)^2 + \frac{\hbar^2\,t^2}{m^2\,(\Delta\,x_0)^2} = (\Delta\,x_0)^2\left[\,1 + \frac{\hbar^2\,t^2}{m^2\,(\Delta\,x_0)^4}\right].$$