

```
> 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

ЦЕНТРАЛЬНОЕ ПОЛЕ

```
> 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=20,legendstyle=[font=["TIMES",BOLD,18],location=bottom],size=[900,600];
frm3d:=axes=boxed,labeldirections=[horizontal,vertical],labelfont=[TIMES,BOLD,18],titlefont=[TIMES,BOLD,20],font=[TIMES,BOLD,20],symbol=solidcircle,symbolsize=20,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 = 20, legendstyle = [font = ["TIMES", BOLD, 18], location = bottom], size = [900, 600]
```

```
frm3d := axes = boxed, labeldirections = [horizontal, vertical], labelfont = [TIMES, BOLD, 18], titlefont = [TIMES, BOLD, 20], font = [TIMES, BOLD, 20], symbol = solidcircle, symbolsize = 18 (1)
```

Уравнение Шредингера для центрального поля

1. В трехмерном случае оператор Гамильтона (оператор полной энергии) $\hat{H}$ частицы массы μ имеет в общем случае вид:

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

Здесь $U(x, y, z)$ - потенциальная энергия системы.

2. Поле называется центральным, если потенциальная энергия зависит только от радиальной координаты:

$$U(x, y, z) = V(r),$$

$$\text{где } r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}.$$

3. Для расчетов в центральном поле полезно перейти к сферической системе координат:

$$(x, y, z) \rightarrow (r, \varphi, \theta)$$

$$x = r \cos(\varphi) \sin(\theta); y = r \sin(\varphi) \sin(\theta); z = r \cos(\theta).$$

U

(2)

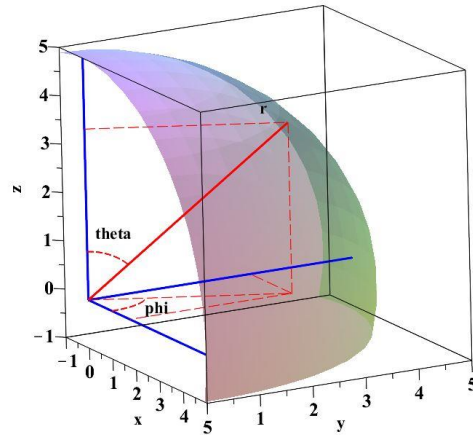
```
> Le:=5;
```

$Le := 5$

(3)

```
> lx:=line([0,0,0],[Le,0,0],color=blue,thickness=3):
ly:=line([0,0,0],[0,Le,0],color=blue,thickness=3):
lz:=line([0,0,0],[0,0,Le],color=blue,thickness=3):
> lr:=line([0,0,0],[Le*cos(Pi/3)*sin(Pi/4),Le*sin(Pi/3)*sin(Pi/4),Le*cos(Pi/4)],color=red,thickness=3,linestyle=solid):
lrxy:=line([Le*cos(Pi/3)*sin(Pi/4),Le*sin(Pi/3)*sin(Pi/4),Le*cos(Pi/4)],color=red,thickness=0,linestyle=longdash):
lrxy1:=line([0,0,0],[Le*cos(Pi/3)*sin(Pi/4),Le*sin(Pi/3)*sin(Pi/4),0],color=red,thickness=0,linestyle=longdash):
lrxy2:=line([0,0,Le*cos(Pi/4)],color=red,thickness=0,linestyle=longdash):
lrxy3:=line([Le*cos(Pi/3)*sin(Pi/4),Le*sin(Pi/3)*sin(Pi/4),0],[0,Le*sin(Pi/3)*sin(Pi/4),0],color=red,thickness=0,linestyle=longdash):
lrxy4:=line([Le*cos(Pi/3)*sin(Pi/4),Le*sin(Pi/3)*sin(Pi/4),0],[Le*cos(Pi/3)*sin(Pi/4),0,0],color=red,thickness=0,linestyle=longdash):
> Sp:=implicitplot3d(x^2+y^2+z^2-Le^2,x=-1..Le,y=0..Le,z=-1..Le,transparency=0.5,style=surface,frm3d,labels=["x","y","z"],orientation=[-33,75,-5],title="Сферическая система координат"):
sp1:=spacecurve([cos(phi),sin(phi),0],phi=0..Pi/3,color=red,thickness=2,linestyle=dash):
sp2:=spacecurve([cos(Pi/3)*sin(t),sin(Pi/3)*sin(t),cos(t)],t=0..Pi/4,color=red,thickness=2,linestyle=dash):
txtL:=textplot3d([1.2,0.75,0,"phi"],[0,0.5,1.3,"theta"],[2,2.5,4,"r"],font=[SYSTEM,BOLD,18]):
```

```
> display(lx,ly,lz,Sp,lr,lrx,lry,lrx1,lry1,lrx2,lry2,lrx3,lry3,lrx4,lry4,sp1,sp2,txtL);
Сферическая система координат
```



В сферической системе координат оператор Гамильтона (полной энергии) можно записать так:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2\mu} \hat{p}^2 + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) + V(r) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + V(r) + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + V(r) - \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \hat{l}^2\end{aligned}$$

Здесь :

$$\hat{l}^2 = -\left(\frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{(\sin(\theta))^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) = -\Delta_{\phi\theta}$$

– квадрат орбитального момента.

Стационарное уравнение Шредингера в сферической системе координат для частицы в центральном поле имеет такой вид :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \Psi(r, \phi, \theta; E) + V(r) \Psi(r, \phi, \theta; E) + \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \hat{l}^2 \Psi(r, \phi, \theta; E) = E \Psi(r, \phi, \theta; E).$$

Это уравнение допускает разделение переменных на радиальную и угловые переменные.

Ищем решение в таком вид :

$$\Psi(r, \phi, \theta; E) = R(r) \Psi(\phi, \theta).$$

Уравнение для угловых переменных имеет такой вид :

$$\hat{l}^2 \Psi(\phi, \theta) = l(l+1) \Psi(\phi, \theta)$$

Соответственно, уравнение для радиальной части волновой функции таково :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + V(r) R(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} R(r) = E R(r).$$

Отсюда функции $\Psi(\phi, \theta)$ являются собственными функциями квадрата орбитального момента $\hat{l}^2$.

Следовательно :

$$\Psi(\phi, \theta) = \Psi_{lm}(\phi, \theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^{|m|}(\theta).$$

Волновые функции радиального движения $R(r)$ определяются в общем случае двумя квантовыми числами

– орбитальным квантовым числом l и номером энергетического уровня – главным квантовым числом n .

$$R(r) = R_{nl}(r).$$

Заготовки функций

```
> U1:=(x,y)->x^2+y^2;
U1r:=(r,phi)->r^2;
U2:=(x,y)->-1/sqrt(x^2+y^2);
U3:=(x,phi,a,U0,U1)->piecewise(0<x and x<a,U0,a<=x, U1);
```

$$U1 := (x, y) \rightarrow y^2 + x^2$$

$$U1r := (r, \phi) \rightarrow r^2$$

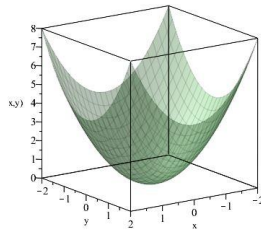
$$U2 := (x, y) \rightarrow -\frac{1}{\sqrt{y^2 + x^2}}$$

$$U3 := (x, \phi, a, U0, U1) \rightarrow \text{piecewise}(0 < x \text{ and } x < a, U0, a \leq x, U1)$$

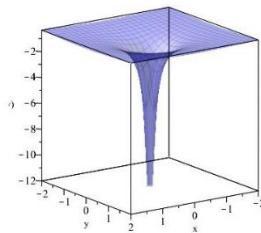
(4)

```
> picUHO2:=plot3d(U1(x,y),x=-2..2,y=-2..2,color="DarkGreen",title="Потенциальная энергия гармонического осциллятора x^2",labels=["x","y","U(x,y)"],transparency=0.7);
plot3d(U2(x,y),x=-2..2,y=-2..2,color=blue,transparency=0.7,title="Потенциал точечного заряда",labels=["x","y","U(x,y)"]); # ,view=[-5..5,0..2.5]
plot3d(U3(x,phi,0,4,4,0.1),x=-10..10,phi=0..2*Pi,coords=cylindrical,color=red,thickness=5,transparency=0.7,title="Прямоугольная яма конечной глубины",labels=["x","y","U(x,y)"],style=surface,grid=[100,100]);# ,view=[-10..10,0..5]
```

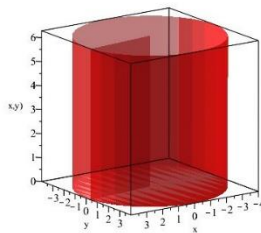
Потенциальная энергия гармонического осциллятора x^2



Потенциал точечного заряда



Прямоугольная яма конечной глубины



4. Граничные условия для волновых функций в яме имеют такой вид :

4.1. Для частицы, энергия которой лежит ниже верхнего значения потенциальной энергии, волновая функция $\psi(x, y, z;$

$E)$ в пределе $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \rightarrow \pm \infty$ стремится к нулю :

$$\lim_{r \rightarrow \pm \infty} \psi(x, y, z; E) = 0.$$

Смысл этого граничного условия состоит, как и в одномерном случае, в том, что при удалении от ямы вероятность найти частицу стремится к нулю.

Задаем значение полной энергии

```
> E:=-8;
```

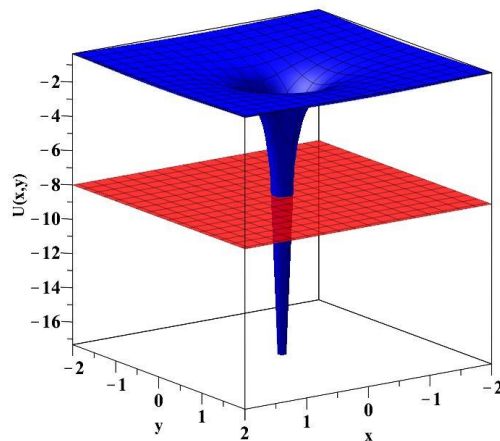
$$E := -8$$

(5)

Рисуем график потенциала и уровень энергии

```
> plot3d([E,U2(x,y)],x=-2..2,y=-2..2,color=[red,blue],transparency=[0.2,0.0],title="Потенциал точечного заряда",
labels=["x","y","U(x,y)"],frm3d,grid=[50,50]);
```

Потенциал точечного заряда



4.2. Бесконечный по высоте барьер

Если потенциальная энергия как функция координаты в точке x_0 имеет бесконечный по энергии разрыв то волновая функция $\psi(x, y, z; E)$ в пределе $(x, y, z) \rightarrow (x_0, y_0, z_0)$ стремится к нулю :

$$\lim_{x \rightarrow x_0} \psi(x, y, z; E) = 0.$$

Особой точкой в сферической системе координат является точка $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} = 0$. Поскольку значения r не могут быть отрицательными, то в этой точке должно выполняться особое условие ограниченности волновой функции:

$$\psi(r, \varphi, \theta; E) \rightarrow C, |C| < \infty$$

4.3. Конечный скачок энергии. Условия сшивки

Если потенциальная энергия как функция координаты в точке x_0 имеет конечный по энергии разрыв то :

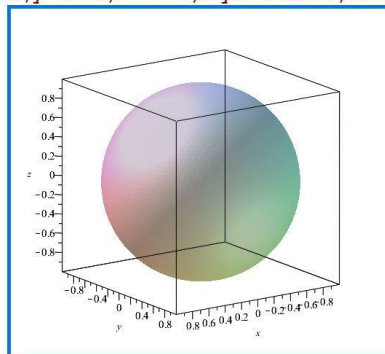
- волновая функция $\psi(x, y, z; E)$ в пределах к этой точке непрерывна :
- производная волновой функции $\psi(x; E)$ в пределах к этой точке непрерывна :

Решение задач

Задача 4.2 ГКК

Частица в бесконечно глубокой сферической яме

```
> implicitplot3d(x^2+y^2+z^2-1,x=-1..1,y=-1..1,z=-1..1,style=surface,transparency=0.5,grid=[50,50,50]);
```



Поскольку сферически бесконечно глубокая яма имеет сферически симметричный потенциал, то его собственные функции являются также и собственными функциями квадрата орбитального момента и проекции орбитального момента на ось z, как уже отмечалось, имеют вид :

$$\Psi(\varphi, \theta) = \Psi_{lm}(\varphi, \theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\theta).$$

Уравнение для радиальной части волновой функции для сферически симметричной бесконечно глубокой ямы можно записать так:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} R(r) = ER(r)$$

Граничные условия для радиальной функции R(r) имеют такой вид:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} R(r) = 0, \quad R(0) = C, \quad |C| < \infty$$

Для решения задач в 3х-мерном центральном поле удобно переписать уравнение в следующем виде :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} (rR(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} (rR(r)) \right) = ER(r)$$

Теперь, если ввести новую функцию :

$$u(r) = rR(r)$$

Уравнение Шредингера приобретает вид одномерного уравнения :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u(r) = Eu(r)$$

с эффективным потенциалом :

$$V_{eff}(r) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{r^2}.$$

Подобная же ситуация имеет место и в классической механике.

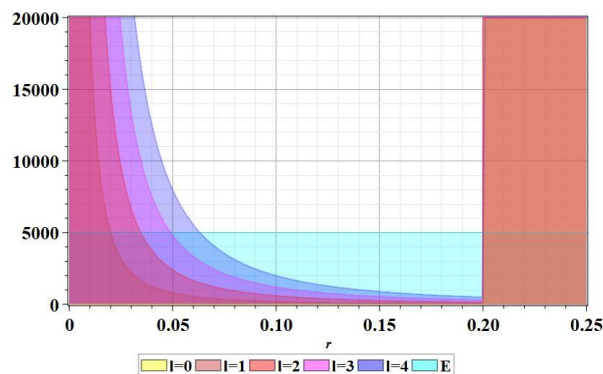
> a:=0.2;U0:=20000;

> Veff:=(r,l,a,U0)->piecewise(0<=r and r<a,l*(l+1)/r^2,U0);

$$V_{eff} := (r, l, a, U0) \rightarrow \text{piecewise} \left(0 \leq r \text{ and } r < a, \frac{l(l+1)}{r^2}, U0 \right)$$

(6)

> plot([Veff(r,0,a,U0),Veff(r,1,a,U0),Veff(r,2,a,U0),Veff(r,3,a,U0),Veff(r,4,a,U0),5000],r=0.0..0.25,color=[yellow,orange,red,magenta,blue,cyan],thickness=2,frm,filled=true,transparency=0.75,view=[0..0.25,0..20000],legend=["l=0","l=1","l=2","l=3","l=4","E"]);



Решение задачи для l=0.

В случае l=0 уравнение Шредингера для функции u=rR(r) принимает вид одномерного уравнения Шредингера для бесконечно глубокой ямы:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2} u(r) = Eu(r),$$

с граничными условиями :

$$u(0) = 0, \quad u(a) = 0.$$

Решение нами было получено ранее для одномерной бесконечно глубокой ямы :

$$u_{n0}(r) = A \sin\left(\frac{\pi n}{a} r\right)$$

Однако условие нормировки теперь должно выглядеть так :

$$4\pi \int_0^a (R_{n0}(r))^2 r^2 dr = 1$$

где :

$$R_{n0}(r) = A \frac{\sin\left(\frac{\pi n}{a} r\right)}{r}, \quad n = 1, 2, \dots$$

Отсюда :

$$4 \pi A^2 \int_0^a \left(\frac{\sin\left(\frac{\pi n}{a} r\right)}{r} \right)^2 r^2 dr = 4 \pi A^2 \int_0^a \left(\sin\left(\frac{\pi n}{a} r\right) \right)^2 dr = 2 \pi A^2 \int_0^a \left(1 - \cos\left(2 \frac{\pi n}{a} r\right) \right) dr = 1$$

Окончательно :

$$2 \pi A^2 a = 1$$

$$A = \frac{1}{\sqrt{2 \pi a}}$$

В результате :

$$u_{n0}(r) = \frac{1}{\sqrt{2 \pi a}} \sin\left(\frac{\pi n}{a} r\right)$$

$$R_{n0}(r) = \frac{1}{\sqrt{2 \pi a}} \frac{\sin\left(\frac{\pi n}{a} r\right)}{r}$$

Соответствующие энергетические уровни равны :

$$E_{n0} = \frac{\hbar^2}{2 \mu} \left(\frac{\pi n}{a} \right)^2.$$

Решение задачи для $l > 0$.

Для построения решений в случае $l > 0$ воспользуемся специальным представлением оператора Шредингера в виде повышающих и понижающих операторов по орбитальному числу.

Введем неэрмитовы операторы следующего вида:

$$b_l^+ = \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l}{r}, \quad b_l^- = \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l}{r}.$$

Вычислим последовательное действие этих операторов :

$$b_l^+ b_l^- u = \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{l}{r} \right) \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{l}{r} \right) u = \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{l^2 + l}{r^2} \right) u = \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u = -\hat{H}_l u$$

$$b_l^- b_l^+ u = \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{l}{r} \right) \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{l}{r} \right) u = \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{l^2 - l}{r^2} \right) u = \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{l(l-1)}{r^2} \right) u = -\hat{H}_{l-1} u$$

Здесь введены обозначения :

$$\hat{H}_l = - \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right)$$

$$\hat{H}_{l-1} = - \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{l(l-1)}{r^2} \right)$$

Теперь уравнения Шредингера для заданного l можно записать так :

$$\hat{H}_l u_l = -b_l^+ b_l^- u_l = \epsilon_l u_l$$

где $\epsilon_l = \frac{2 m E}{\hbar^2}$ — безразмерная энергия.

Поддействуем оператором b_l^- на это уравнение. В результате получим :

$$-b_l^- b_l^+ b_l^- u_l = \epsilon_l b_l^- u_l$$

Если ввести обозначение $w_l = b_l^- u_l$ то уравнение примет такой вид :

$$-b_l^- b_l^+ w_l = \epsilon_l w_l = \hat{H}_{l-1} w_l = \epsilon_l w_l$$

Т.е. если u_l — решение уравнения для l , то функция $w_l = b_l^- u_l$ — есть решение для $l-1$. Это означает, что оператор

b_l^- превращает волновую функцию с номером l в волновую функцию с номером $l-1$.

При этом $\epsilon_l = \epsilon_{l-1}$.

Поэтому

$$b_l^- u_l = \Gamma_l^- u_{l-1}$$

Если теперь исходить из уравнения :

$$\hat{H}_{l-1} u_{l-1} = \epsilon_{l-1} u_{l-1} = -b_l^- b_l^+ u_{l-1},$$

то действуя на него оператором b_l^+ можно по аналогии показать, что функция $v_l = b_l^+ u_{l-1}$, удовлетворяет уравнению Шредингера для значения орбитального числа l . Т.е.:

$$b_l^+ u_{l-1} = \Gamma_l^+ u_l$$

Числа Γ_l^- и Γ_l^+ вычисляются,

как и в случае других повышающих и понижающих операторов с помощью вычисления скалярных произведений :

$$(b_l^- u_r b_l^- u_l) = (\Gamma_l^-)^2$$

$$(b_l^+ u_{l-1}, b_l^+ u_{l-1}) = (\Gamma_{l-1}^+)^2$$

Учитывая, что $(b_l^-)^+ = -b_l^+$ (операторы антисопряжены друг другу), находим :

$$(b_l^- u_r b_l^- u_l) = -(u_r b_l^+ b_l^- u_l) = (\Gamma_l^-)^2 = \epsilon_l$$

$$(b_l^+ u_{l-1}, b_l^+ u_{l-1}) = -(u_{l-1}, b_l^- b_l^+ u_{l-1}) = (\Gamma_{l-1}^+)^2 = \epsilon_{l-1}$$

Отсюда следует, что если известны решения уравнения u_{l-1} для $l-1$, то действуя на них оператором b_l^+ , можно найти решения уравнения u_l для l .

Отсюда следует, что решение для $l=1$ можно получить, действуя на решения при $l=0$ оператором b_1^+ :

$$u_1 = \frac{1}{\Gamma_1^+} b_1^+ u_0 = \frac{1}{\Gamma_1^+} \left(-\frac{\partial}{\partial r} - \frac{l}{r} \right) \sin \left(\sqrt{\frac{2}{a}} \sin \left(\frac{\pi r}{a} \right) \right)$$

Однако, если просто воспользоваться этим соотношением, подставив в него решения u_0

то мы получим не верный результат. Проблема состоит в том, что наша бесконечно глубокая яма имеет разрыв в точке $r = a$ и при действии операторов b_l^+ в уравнение Шредингера будут появляться дополнительные слагаемые.

Поэтому необходимо решения задач при $l > 0$ немного скорректировать.

Формула для волновых функций внутри ямы были получены верно.

Необходимо только изменить решения задач в точке $r = a$. Для этого мы рассмотрим общее решение для $l = 0$ до использования граничных условий, применим к ним повышающий оператор и получим общее решение для $l = 1$. Затем к этим функциям применим граничные условия.

Общее решение для $u_0(r)$ имеет такой вид :

$$u_0(r) = A \sin(kr) + B \cos(kr),$$

где $k^2 = \epsilon_0$. Подействуем на это решение оператором b_1^+ , получаем :

$$u_1(r) = \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \right) (A \sin(kr) + B \cos(kr)) = \left(Ak - \frac{B}{r} \right) \cos(kr) - \left(Bk + \frac{A}{r} \right) \sin(kr).$$

Применяем граничные условия в нуле :

$$\lim_{r \rightarrow 0} u_1(r) = Ak - B \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\cos(kr)}{r} - A \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\sin(kr)}{r} = 0$$

Для того, чтобы это условие выполнялось, необходимо, чтобы B

$= 0$. Остальная часть обращается в ноль при любом A в силу превого замечательного предела :

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{\sin(kr)}{r} = k.$$

Теперь применяем граничные условия в точке $r = a$. Имеем (с учетом $B = 0$) :

$$u_1(a) = Ak \cos(ka) - \frac{A \sin(ka)}{a} = 0.$$

Следовательно волновое число k должно удовлетворять уравнению :

$$ka = \text{tg}(ka).$$

Графическое решение этого уравнения представлено ниже.

Его можно получить по аналогии с одномерной ямой конечной глубины (Задание 3)

Определяем функции для графического решения задачи

```
>
> Eq:=(xi)->evalf(xi-tan(xi)); # Введено обозначение xi=ka
                                Eq := xi -> evalf(xi - tan(xi))
```

(7)

Начальная точка из списка решений уравнения для четных состояний

В качестве начальной точки взята точка начала координат (для создания начала списка)

```
> AllPX:=point([0,0],color=red,symbol=solidcircle,symbolsize=14):
```

Задаем число диапазонов значений параметров ямы, для которых ищутся решения:

```
> M:=5; # Число можно самостоятельно менять, но не следует задавать слишком большие числа
                                M := 5
```

(8)

Вычисление всех решений для $l=1$

Решения уравнений ищутся в диапазонах $[\pi \cdot (k-1) \dots \pi \cdot k]$, $k=1, \dots, M$

```

> for k from 1 to M do # Цикл по диапазонам
# Вычисление решений уравнения для волновых чисел
X[k]:=evalf(fsolve(Eq(x), x=Pi*(k-1)..Pi*k));
# Проверка существования решения в численном виде в данном диапазоне
if type(X[k], 'numeric') then
print("k=", k, X[k]); # Печатаем вычисленные значения k1*a
# Создание точки пересечения графиков, если она существует
PX[k]:=point([X[k], tan(X[k])], color=red,
symbol=solidcircle, symbolsize=14);
# Создание списка изображений точек пересечения
AllPX:=AllPX, PX[k];
end if;
#AllPX:=AllPX, PX0[j];
end do;

```

```

"k=", 1, 0.
"k=", 2, 4.493409458
"k=", 3, 7.725251837
"k=", 4, 10.90412166
"k=", 5, 14.06619391

```

(9)

В массиве $X[n]$ лежат значения произведения $k_n a$, соответствующие энергетическим уровням для $l=1$.

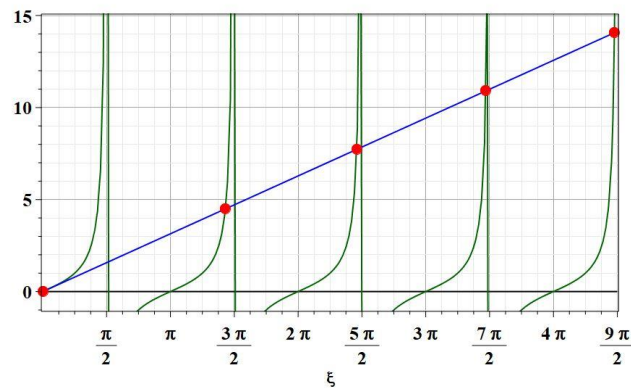
Вывод графиков и точек на экран

```

> PGsolP:=plot([0, tan(xi)], xi=0..4*Pi+Pi/2, frm, color=[black, "DarkGreen", blue], thickness=2, title="Графическое
решение задачи для l=1 \n", view=[0..4*Pi+Pi/2, -1..15]);
>
> display(PGsolP, AllPX);

```

Графическое решение задачи для $l=1$



Пусть k_n - решения для волновых чисел ($n=1,2,\dots$). Тогда:

$$u_{nl}(r) = A \left(k_n \cos(k_n r) - \frac{\sin(k_n r)}{r} \right)$$

и

$$R_{nl}(r) = A \frac{1}{r} \left(k_n \cos(k_n r) - \frac{\sin(k_n r)}{r} \right)$$

Условие нормировки функций $R_{nl}(r)$ находятся из вычисления интегралов:

$$4\pi \int_0^a (R_{nl}(r))^2 r^2 dr = 4\pi A^2 \int_0^a \left(k_n \cos(k_n r) - \frac{\sin(k_n r)}{r} \right)^2 dr = 1$$

$$\frac{6_n}{false}$$

(10)

```

> R:=(r,k)->k*cos(k*r)-sin(k*r)/r;

```

$$R := (r, k) \rightarrow k \cos(kr) - \frac{\sin(kr)}{r}$$

(11)

```

> 4*Pi*A^2*int(R(r,p)^2, r=0..a0);

```

$$\frac{2\pi A^2 (\cos(p a0) \sin(p a0) a0 p + a0^2 p^2 + \cos(2 p a0) - 1)}{a0}$$

(12)

Отсюда, полагая $p=k_n$, $a0=a$, находим:

$$A = \sqrt{\frac{1}{2\pi} \frac{a}{(k_n a)^2 - (\sin(k_n a))^2}}$$

Строим графики волновых функций.

```
> R0:=(r,n,a)->sqrt(1/2/Pi/a)*sin(Pi*n*r/a)/r;
```

$$R0 := (r, n, a) \rightarrow \sqrt{\frac{1}{2\pi a}} \frac{\sin\left(\frac{\pi n r}{a}\right)}{r} \quad (13)$$

```
>
```

```
> R1:=(r,n,a,X)->sqrt(1/2/Pi/a)*sqrt(1/(X[n+1]^2-sin(X[n+1])^2))*X[n+1]*(cos(X[n+1]*r/a)-sin(X[n+1]*r/a)/(X[n+1]*r/a))/r;
```

$$R1 := (r, n, a, X) \rightarrow \sqrt{\frac{1}{2\pi a}} \sqrt{\frac{1}{X_{n+1}^2 - \sin(X_{n+1})^2}} X_{n+1} \left(\cos\left(\frac{X_{n+1} r}{a}\right) - \frac{\sin\left(\frac{X_{n+1} r}{a}\right)}{X_{n+1} r} \right) \quad (14)$$

```
> a:=0.2;
```

$$a := 0.2 \quad (15)$$

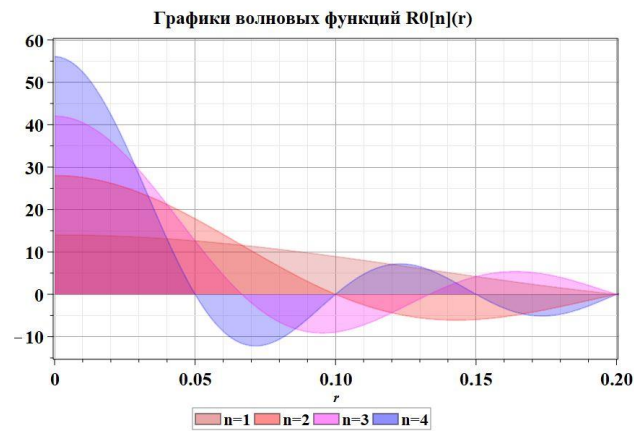
Проверяем нормировку волновых функций:

```
> 4*Pi*int(R0(r,1,a0)^2*r^2,r=0..a0);
4*Pi*int(R1(r,1,a0,X)^2*r^2,r=0..a0);
```

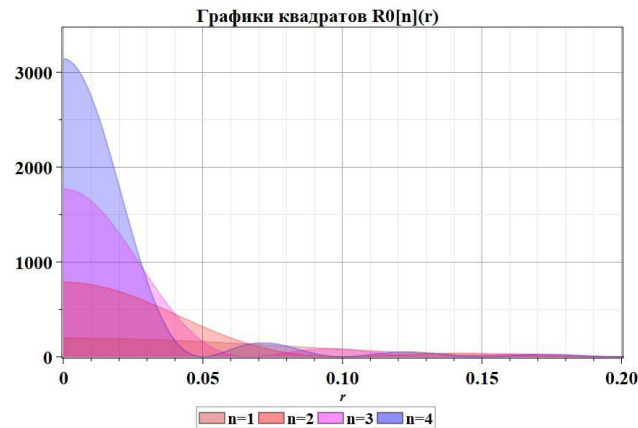
$$\begin{matrix} 1 \\ 0.9999999992 \end{matrix} \quad (16)$$

Выводим графики волновых функций на экран.

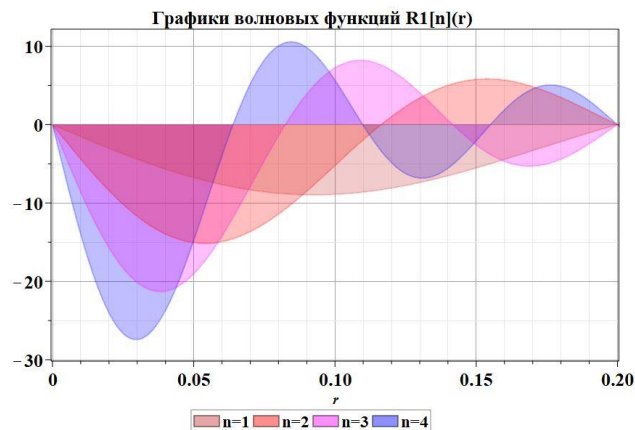
```
> plot([R0(r,1,a),R0(r,2,a),R0(r,3,a),R0(r,4,a)],r=0..0.25,color=[orange,red,magenta,blue],thickness=2,frm,
filled=true,transparency=0.75,legend=["n=1","n=2","n=3","n=4"],title="Графики волновых функций R0[n](r)",view=
[0..a,-15..60]);
```



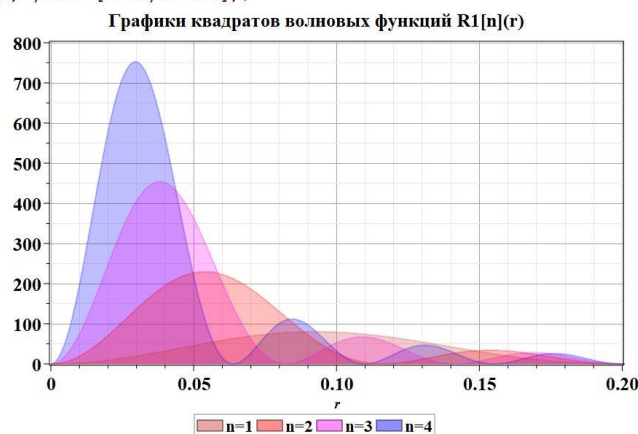
```
> plot([R0(r,1,a)^2,R0(r,2,a)^2,R0(r,3,a)^2,R0(r,4,a)^2],r=0..0.25,color=[orange,red,magenta,blue],thickness=
2,frm,filled=true,transparency=0.75,legend=["n=1","n=2","n=3","n=4"],title="Графики квадратов R0[n](r)",view=
[0..a,0..3460]);
```



```
> plot([R1(r,1,a,X),R1(r,2,a,X),R1(r,3,a,X),R1(r,4,a,X)],r=0.0..0.25,color=[orange,red,magenta,blue],thickness=
2,frm,filled=true,transparency=0.75,legend=["n=1","n=2","n=3","n=4"],title="Графики волновых функций R1[n](r)
",view=[0..a,-30..12]);
```



```
> plot([R1(r,1,a,X)^2,R1(r,2,a,X)^2,R1(r,3,a,X)^2,R1(r,4,a,X)^2],r=0.0..0.25,color=[orange,red,magenta,blue],
thickness=2,frm,filled=true,transparency=0.75,legend=["n=1","n=2","n=3","n=4"],title="Графики квадратов
волновых функций R1[n](r)",view=[0..a,0..800]);
```



Задача 4.2 ГКК

Найти решение состояния сферически симметричного гармонического осциллятора с фиксированным орбитальным числом l и магнитным числом m (проекцией орбитального момента на ось z).

Поскольку сферически симметричный гармонический осциллятор имеет сферически симметричный потенциал, то его собственные функции являются также и собственными функциями квадрата орбитального момента и проекции орбитального момента на ось z , как уже отмечалось, имеют вид:

$$\Psi(\varphi, \theta) = \Psi_{lm}(\varphi, \theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\theta).$$

Уравнение для радиальной части волновой функции для сферически симметричного гармонического осциллятора можно записать так:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{\mu\omega^2}{2} r^2 R(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} R(r) = ER(r)$$

Error, invalid input: R uses a 2nd argument, k, which is missing

Граничные условия для радиальной функции $R(r)$ имеют такой вид:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} R(r) = 0, \quad R(0) = C, \quad |C| < \infty$$

Для решения задач в 3-мерном центральном поле удобно переписать уравнение в следующем виде:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} (rR(r)) + \frac{l(l+1)}{r^2} (rR(r)) \right) + \frac{\mu\omega^2}{2} r^2 R(r) = ER(r)$$

Теперь, если ввести новую функцию :

$$u(r) = rR(r)$$

Уравнение Шредингера приобретает вид одномерного уравнения :

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2} u(r) + \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{\mu^2 \omega^2}{\hbar^2} r^2 \right) u(r) = Eu(r)$$

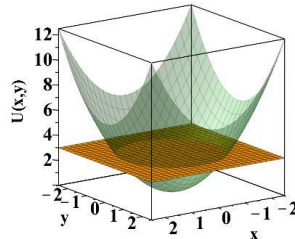
с эффективным потенциалом :

$$V_{eff}(r) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{\mu^2 \omega^2}{\hbar^2} r^2 \right).$$

Подобная же ситуация имеет место и в классической механике.

> `picUHO2:=plot3d([U1(x,y),3],x=-2.5..2.5,y=-2.5..2.5,color=["DarkGreen",coral],title="Потенциальная энергия гармонического осциллятора",labels=["x","y","U(x,y)"],frm3d,transparency=[0.7,0]);`

Потенциальная энергия гармонического осциллятора



Приведем радиальную часть уравнения Шредингера к безразмерному виду, полагая:

$$\xi = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}} r \quad \text{и} \quad \epsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}. \quad \text{В результате приходим к такому уравнению:}$$

$$-\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} u(\xi) + \left(\frac{l(l+1)}{\xi^2} + \xi^2 \right) u(\xi) = \epsilon u(\xi)$$

Представим левую часть этого уравнения в виде произведения пары сопряженных друг другу неэрмитовых операторов следующего вида :

$$\hat{c}_l^+ = \frac{1}{\xi} + \xi - \frac{\partial}{\partial \xi}, \quad \hat{c}_l^- = \frac{1}{\xi} + \xi + \frac{\partial}{\partial \xi}$$

Действительно, вычисляем :

$$\hat{c}_l^+ \hat{c}_l^- = \left(\frac{1}{\xi} + \xi - \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \left(\frac{1}{\xi} + \xi + \frac{\partial}{\partial \xi} \right) = -\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \xi^2 + \frac{l(l+1)}{\xi^2} + 2l - 1,$$

$$\hat{c}_l^- \hat{c}_l^+ = \left(\frac{1}{\xi} + \xi + \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \left(\frac{1}{\xi} + \xi - \frac{\partial}{\partial \xi} \right) = -\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \xi^2 + \frac{l(l-1)}{\xi^2} + 2l + 1,$$

Если обозначить :

$$\hat{H}_l = -\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \xi^2 + \frac{l(l+1)}{\xi^2},$$

то последние соотношения можно записать в таком виде :

$$\hat{H}_l = \hat{c}_l^+ \hat{c}_l^- - 2l + 1,$$

$$\hat{H}_{l-1} = \hat{c}_l^- \hat{c}_l^+ - 2(l-1) - 3$$

Это означает, что уравнение Шредингера можно записать двумя способами :

$$\hat{H}_l u_l(r) = \hat{c}_l^+ \hat{c}_l^- u_l(r) - (2l-1)u_l(r) = \epsilon_l u_l(r)$$

$$\hat{H}_{l-1} u_{l-1}(r) = \hat{c}_l^- \hat{c}_l^+ u_{l-1}(r) - (2(l-1)+3)u_{l-1}(r) = \epsilon_{l-1} u_{l-1}(r)$$

Перепишем эти уравнения таким образом :

$$\hat{c}_l^+ \hat{c}_l^- u_l(r) = ((2l-1) + \epsilon_l) u_l(r)$$

$$\hat{c}_l^- \hat{c}_l^+ u_{l-1}(r) = ((2(l-1)+3) + \epsilon_{l-1}) u_{l-1}(r)$$

Как и в случае других повышающих и понижающих операторов подействуем на эти уравнения слева операторами $\hat{c}_l^+$ и $\hat{c}_l^-$,

соответственно. В результате находим :

$$\hat{c}_l^- \hat{c}_l^+ (\hat{c}_l^- u_l(r)) = ((2l-1) + \epsilon_l) (\hat{c}_l^- u_l(r))$$

$$\hat{c}_l^+ \hat{c}_l^- (\hat{c}_l^+ u_{l-1}(r)) = ((2(l-1)+3) + \epsilon_{l-1}) (\hat{c}_l^+ u_{l-1}(r))$$

Видно, что уравнения переходят в друг друга, если ввести обозначения :

$$w_l = \hat{c}_l^- u_l(r) = \Gamma_l^- u_{l-1}(r)$$

$$v_l = \hat{c}_l^+ u_{l-1}(r) = \Gamma_l^+ u_l(r)$$

Таким образом, $\hat{c}_l^+$ и $\hat{c}_l^-$

– повышающий и понижающий операторы по орбитальному числу в задаче о гармоническом осцилляторе.

Это означает, что если мы знаем волновые функции $u_{n0}(r)$ для $l = 0$ и для всех номеров уровней n , то можем,

применяя повышающие оператор $\hat{c}_l^+$, найти все волновые функции $u_{nl}(r)$ с $l > 0$.

При этом должно выполняться равенство :

$$(2l-1) + \epsilon_l = (2(l-1) + 3) + \epsilon_{l-1}.$$

Отсюда находим :

$$\epsilon_l = \epsilon_{l-1} + 2.$$

Окончательно :

$$\epsilon_l = 2l + \epsilon_0$$

Задача с $l = 0$.

$$-\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} u(\xi) + \xi^2 u(\xi) = \epsilon u(\xi)$$

Это уравнение совпадает с уравнением для одномерного гармонического осциллятора с тем отличием, что при r

$= 0$ должно выполняться граничное условие :

$$u(0) = 0.$$

В силу того, что волновые функции одномерного гармонического осциллятора распадаются на два класса

– четные и нечетные (потенциал гармонического осциллятора – четная функция), то нужные нам решены, удовлетворяющие граничному условию

$$u(0) = 0$$

нечетными волновыми функциями одномерного гармонического осциллятора. Т.е.

$$u_{n0}(r) = \hat{a}^+ \hat{a}^+ \dots \hat{a}^+ u_{00}(r), \quad u_{00}(x) = C e^{-\frac{r^2}{2r_0^2}}, \quad r_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}, \quad n = 1, 2, \dots$$

| 2n-1 раз |

Здесь

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{r}{r_0} - r_0 \frac{\partial}{\partial r} \right)$$

– повышающий оператор одномерного гармонического осциллятора.

Общее решение теперь можно записать так :

$$u_{nl}(x, y) = \hat{c}_l^+ \hat{c}_{l-1}^+ \dots \hat{c}_1^+ \hat{a}^+ \hat{a}^+ \dots \hat{a}^+ \psi_{00}(r), \quad \psi_{00}(r) = C e^{-\frac{r^2}{2r_0^2}}$$

Соответственно, находим значения собственных энергий :

$$\epsilon_{l,n} = 2l + 2n + 1, \quad n = 0, \dots, \infty, \quad l = 0, \dots, \infty$$

$$E_{nl} = \hbar\omega \left(n + l + \frac{1}{2} \right)$$

В частности :

$$n = 1, l = 0: \quad u_{10}(r) = C \frac{r}{r_0} e^{-\frac{r^2}{2r_0^2}} = C \xi e^{-\frac{\xi^2}{2}},$$

$$n = 1, l = 1: \quad u_{11}(\xi) = C \left(\frac{1}{\xi} + \xi - \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \xi e^{-\frac{\xi^2}{2}} = 2 C \xi^2 e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

$$n = 1, l = 2: \quad u_{12}(\xi) = 2 C \left(\frac{2}{\xi} + \xi - \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \xi^2 e^{-\frac{\xi^2}{2}} = 4 C \xi^3 e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

Нормировочный коэффициент C вычислите самостоятельно, можно с помощью вычисления в Maple.

Вычислите волновые функции состояний

$u_{20}(\xi)$, $u_{21}(\xi)$ и $u_{22}(\xi)$. Постройте графики этих функций, а также функций :

$$R_{20}(r) = \frac{1}{r} u_{20}\left(\frac{r}{r_0}\right), \quad R_{21}(r) = \frac{1}{r} u_{21}\left(\frac{r}{r_0}\right), \quad R_{20}(r) = \frac{1}{r} u_{22}\left(\frac{r}{r_0}\right)$$

```
> u[1,0] := (xi) -> xi*exp(-xi^2/2)*C;
```

$$u_{1,0} := \xi \rightarrow \xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2} C$$

(18)

```
> u[1,1] := (xi, eta) -> -subs(y=xi, diff(u[1,0](y), y)) + (xi+1/xi)*u[1,0](xi);
u[1,2] := (xi, eta) -> -subs(y=xi, diff(u[1,1](y), y)) + (xi+2/xi)*u[1,1](xi);
```

$$u_{1,1} := (\xi, \eta) \rightarrow -\text{subs}\left(y = \xi, \frac{d}{dy} u_{1,0}(y)\right) + \left(\xi + \frac{1}{\xi}\right) u_{1,0}(\xi)$$

$$u_{1,2} := (\xi, \eta) \rightarrow -\text{subs}\left(y = \xi, \frac{d}{dy} u_{1,1}(y)\right) + \left(\xi + \frac{2}{\xi}\right) u_{1,1}(\xi)$$

(19)

```

>
> u[1,0](xi);
> simplify(u[1,1](xi));
> simplify(u[1,2](xi));

```

$$\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2} C$$

$$2\xi^2 e^{-\frac{1}{2}\xi^2} C$$

$$4\xi^3 e^{-\frac{1}{2}\xi^2} C$$

(20)

Строим графики нескольких первых собственных функций с фиксированной энергией

```

> C:=1; # Вычислите нормировку функций самостоятельно

```

$C := 1$

(21)

```

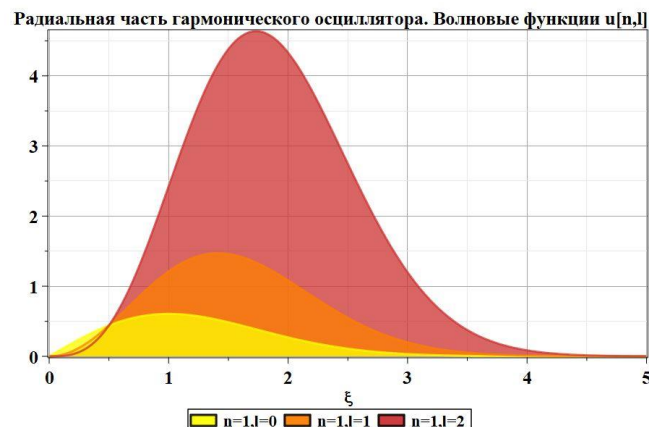
> picH000u:=plot([u[1,0](xi),u[1,1](xi),u[1,2](xi)],xi=0..5,title="Радиальная часть гармонического осциллятора. Волновые функции u[n,l]. Волновые функции u[n,l]",transparency=0.25,thickness=3,color=[yellow,coral,orange],filled=true,frm,legend=["n=1,l=0 ","n=1,l=1 ","n=1,l=2 "]):

```

```

> display(picH000u);

```



```

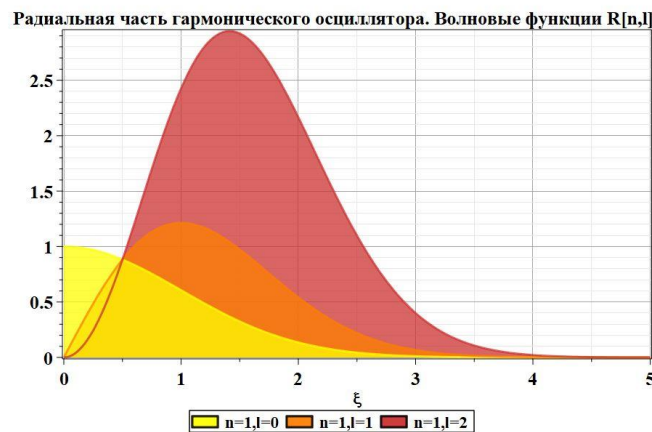
> picH000R:=plot([u[1,0](xi)/xi,u[1,1](xi)/xi,u[1,2](xi)/xi],xi=0..5,title="Радиальная часть гармонического осциллятора. Волновые функции R[n,l]. Волновые функции R[n,l]",transparency=0.25,thickness=3,color=[yellow,coral,orange],filled=true,frm,legend=["n=1,l=0 ","n=1,l=1 ","n=1,l=2 "]):

```

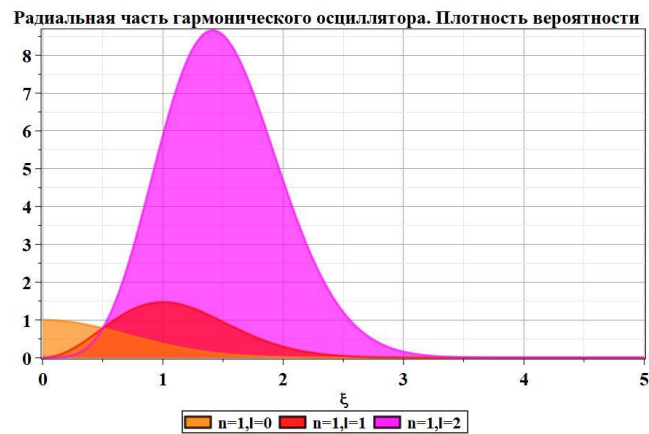
```

> display(picH000R);

```



```
> picH000R2:=plot([u[1,0] (xi)^2/xi^2,u[1,1] (xi)^2/xi^2,u[1,2] (xi)^2/xi^2],xi=0..5,title="Радиальная часть
гармонического осциллятора. Плотность вероятности",transparency=0.35,thickness=3,color=[coral,red,magenta],
filled=true,frm,legend=[" n=1,l=0 "," n=1,l=1 "," n=1,l=2 "]):
> display(picH000R2);
```



ЗАДАЧИ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОГО РЕШЕНИЯ

Задача 1

Найдите волновые функции и энергии в сферической яме бесконечной глубины для $l=2$. Постройте графики волновых функций и плотности вероятности радиальной части.

Задача 2

Найдите волновые функции и энергии в сферического осциллятора для $n=2$ и $l=0,1,2$. Постройте графики волновых функций и плотности вероятности радиальной части.