```
> restart;
```

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

Уравнение Паули

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

Формат графиков

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

Уравнение Паули

Уравнение Паули частицы со спином 1/2

В случае частиц со спином уравнение Шредингера должно быть изменено, поскольку изначально неизвестно, в каком из возможных двух внутренних состояний находится частица.

Поэтому для того, чтобы описать оба состояния (**в отсутствие магнитного поля!**) необходимо записывать уравнение Шредингера для волновых функций двух состояний:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi_1}{\partial t} = \hat{H}\,\psi_1,\quad i\hbar\frac{\partial\psi_2}{\partial t} = \hat{H}\,\psi_2.$$

Здесь ψ_1 *− состояние с проекцией спина на одну из осей,*

а ψ_2 *− с противоположной проекцией на ту же ось.*

Эти два уравнения удобно объединить в одно уравнение относительно спинора:

$$\mathbf{\Psi} = \begin{bmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{bmatrix}$$

Именно:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{bmatrix} = \hat{H}\begin{bmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{bmatrix}$$

или

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{\Psi} = \hat{H}\,\Psi.$$

В случае отсутствия магнитного поля оператор Гамильтона (*оператор полной энергии*):

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

Если частица заряжена и не имеет спина, то уравнение Шредингера можно представить в виде:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + c\phi(x,y,z,t) =$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) - \frac{e}{2mc}\left(A_x\hat{p}_x + A_y\hat{p}_y + A_z\hat{p}_z\right) - \frac{e}{2mc}\left(\hat{p}_xA_x + \hat{p}_yA_y + \hat{p}_zA_z\right) + c\phi(x,y,z,t).$$

или таким образом:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{\Psi} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + \frac{ie\hbar}{mc}\left(A_x\frac{\partial}{\partial x} + A_y\frac{\partial}{\partial y} + A_z\frac{\partial}{\partial z}\right) + \frac{ie\hbar}{2mc}\left(\frac{\partial}{\partial x}A_x + \frac{\partial}{\partial y}A_y + \frac{\partial}{\partial z}A_z\right) + c\phi(x,y,z,t)\right)\mathbf{\Psi}$$

Используя калибровку векторного потенциала магнитного поля следующего вида:

$$\frac{\partial}{\partial x}A_x + \frac{\partial}{\partial y}A_y + \frac{\partial}{\partial z}A_z = divA = 0$$

Приходим к уравнению Шредингера в такой форме:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{\Psi} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + \frac{ie\hbar}{mc}\left(A_x\frac{\partial}{\partial x} + A_y\frac{\partial}{\partial y} + A_z\frac{\partial}{\partial z}\right) + \frac{e^2}{2mc^2}\boldsymbol{A}^2 + c\phi(x,y,z,t)\right)\mathbf{\Psi}$$

Однако в случае движения частицы ***со спином*** *во внешнем магнитном поле это уравнение следует изменить,*
поскольку к привычному уже оператору полной энергии (оператору Гамильтона)
необходимо добавить энергию взаимодействия собственного магнитного поля частицы (электрона) с внешним магнитным полем.
В классической механике энергия такого взаимодействия описывается формулой :

$$E_{int} = -(\boldsymbol{H}, \boldsymbol{\mu}) = -H_x\mu_x - H_y\mu_y - H_z\mu_z,$$

где $\boldsymbol{\mu} = (\mu_x, \mu_y, \mu_z)$ *— вектор магнитного момента частицы, а* $\boldsymbol{H} = (H_x, H_y, H_z)$
– вектор напряженности внешнего магнитного поля в точке пространства, где находится частица.

Согласно формуле Уленбека-Гаудсмита магнитный момент частицы со спином 1/2 может быть вычислен в такой форме:

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{e}{mc}\hbar\mathbf{s},$$

где **s** - вектор спина (со значением ±1/2), e -заряд частицы, m - масса частицы, c - скорость света, $\hbar$ - постоянная Планка. В более общем виде эту формулу записывают так:

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{e}{2\,mc}g\hbar\mathbf{s}.$$

Для электрона g≈2 или g=2+δg. Добавка к магнитному моменту, связанная с δg, **называется аномальным магнитным моментом электрона. У других частиц аномальный магнитный момент может быть в несколько раз больше, чем нормальный.**

Спин является оператором с компонентами: $\hat{\boldsymbol{s}} = (\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z)$,
которые являются матрицами 2x2:

$$\hat{s}_x = \frac{1}{2}\hat{\sigma}_x, \quad \hat{s}_y = \frac{1}{2}\hat{\sigma}_y, \quad \hat{s}_z = \frac{1}{2}\hat{\sigma}_z.$$

Здесь $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$ - матрицы Паули:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Следовательно:

$$\hat{s}_x = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{s}_y = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{s}_z = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Таким образом, добавочная энергия к оператору Гамильтона частицы со спином имеет вид:

$$\hat{E}_{int} = -(\boldsymbol{H}, \hat{\boldsymbol{\mu}}) = -H_x\hat{\mu}_x - H_y\hat{\mu}_y - H_z\hat{\mu}_z = -\frac{e\hbar}{2\,mc}\left(H_x\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} + H_y\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} + H_z\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\right)$$

В этом случае уравнение Шредингера принимает вид:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{\Psi} =$$

$$= \left(\left(-\frac{\hbar^2}{2\,m}\Delta + \frac{ie\hbar}{m\,c}\left(A_x\frac{\partial}{\partial x} + A_y\frac{\partial}{\partial y} + A_z\frac{\partial}{\partial z}\right) + \frac{e^2}{2\,m\,c^2}\boldsymbol{A}^2 + c\phi(x, y, z, t)\right)\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} - \frac{e\hbar}{2\,mc}(\boldsymbol{H}, \hat{\boldsymbol{\sigma}})\right)\boldsymbol{\Psi},$$

где

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$$

- вектор матриц Паули,

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

- оператор Лапласа.

Это уравнение для частицы со спином 1/2 называется **уравнением Паули!**

Уравнение Паули для частицы со спином 1/2 в однородном магнитном поле, направленном вдоль оси z, имеет в общем случае вид:

$$\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix} = \left(\left(-\frac{\hbar^2}{2\,m}\Delta + \frac{ie\hbar}{m\,c}\left(A_x\frac{\partial}{\partial x} + A_y\frac{\partial}{\partial y}\right) + \frac{e^2}{2\,m\,c^2}\boldsymbol{A}^2\right)\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} - \frac{e\hbar}{2\,mc}H_z\hat{\boldsymbol{\sigma}}_z\right)\begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix},$$

где H_z - напряженность магнитного поля и

$$A_x = -\frac{1}{2}H_z y, \quad A_y = \frac{1}{2}H_z x$$

В результате уравнение можно записать в таком виде :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix} = \left(\left(-\frac{\hbar^2}{2\,m}\Delta - \frac{ie\hbar H_z}{2\,m\,c}\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right) + \frac{e^2H_z^2}{8\,m\,c^2}(x^2 + y^2)\right)\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} - \frac{e\hbar}{2\,mc}H_z\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\right)\begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix}.$$

Величина $\Omega_L = \dfrac{eH_z}{2\,m\,c}$ называется частотой Лармора. Если учесть, что оператор:

$$\hat{l}_z = -\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

есть проекция орбитального момента на ось z, то уравнение можно записать в виде :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix} = \left(\left(-\frac{\hbar^2}{2\,m}\Delta + i\Omega_L\hat{l}_z + \frac{e^2H_z^2}{8\,m\,c^2}(x^2 + y^2)\right)\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} - \frac{e\hbar}{2\,mc}H_z\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\right)\begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix}.$$

В покомпонентной записи имеем два уравнения:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_1 = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + i\Omega_L\hat{l}_z + \frac{e^2H_z^2}{8mc^2}\left(x^2+y^2\right) - \frac{e\hbar}{2mc}H_z\right)\psi_1\,,$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_2 = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + i\Omega_L\hat{l}_z + \frac{e^2H_z^2}{8mc^2}\left(x^2+y^2\right) + \frac{e\hbar}{2mc}H_z\right)\psi_2\,.$$

Уравнение Паули для нейтральной частицы со спином 1/2.

Если частица не заряжена, т.е. нейтральна, то уравнение Паули имеет более простой вид:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{\Psi} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}\Delta - \frac{e\hbar}{2mc}(\boldsymbol{H},\hat{\boldsymbol{\sigma}})\right)\boldsymbol{\Psi}.$$

Этим уравнением описываются состояния таких частиц, как нейтрон n . Нейтральной частицей также является нейтрино ν. Однако считается, что нейтрино имеет массу 0. Поэтому нейтрино должно описываться другим уравнением, относящимся к релятивистской квантовой механике. В случае, если магнитное поле однородно и направлено вдоль оси z, то уравнение Паули примет вид:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{\Psi} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix} - \frac{e\hbar}{2mc}H_z\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\right)\boldsymbol{\Psi}.$$

В покомпонентной записи :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_1 = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e\hbar}{2mc}H_z\right)\psi_1\,,$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_2 = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{e\hbar}{2mc}H_z\right)\psi_2\,.$$

Решение задач

Задача 7.40 ГКК

7.40. Найти операторы скорости $\hat{\mathbf{v}}$ и ускорения $\hat{\mathbf{w}}$ (в шредингеровском представлении) нейтральной частицы с отличным от нуля спиновым магнитным моментом (например, нейтрона), находящейся в магнитном поле.

Согласно общему правилу вычисления производных от оператора $\hat{Q}$ (см. Задание 5) имеем:

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

где $\hat{H}$ *– оператор Гамильтона системы.*

В нашем случае оператор Гамильтона нейтральной частицы со спином $\left(s=\frac{1}{2}\right)$ *имеет вид* :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix} - \frac{e\hbar}{2mc}(\boldsymbol{H},\hat{\boldsymbol{\sigma}}) = \frac{1}{2m}\hat{\boldsymbol{p}}^2\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix} - \frac{e\hbar}{2mc}(\boldsymbol{H},\hat{\boldsymbol{\sigma}}).$$

Оператор координаты в данном случае также должен представляться матрицей :

$$\hat{\boldsymbol{r}} = (x, y, z)\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}$$

Этот оператор явно от времени не зависит. Поэтому :

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

Вычисляем коммутатор :

$$[\hat{H},\hat{x}] = \left[\frac{1}{2m}\hat{\boldsymbol{p}}^2\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix} - \frac{e\hbar}{2mc}(\boldsymbol{H},\hat{\boldsymbol{\sigma}}),\, x\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}\right] = \left[\frac{1}{2m}\hat{\boldsymbol{p}}^2\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix},\, x\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}\right] =$$

$$= \frac{1}{2m}\left[\hat{\boldsymbol{p}}^2, x\right]\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix} = \frac{1}{2m}\left[\hat{p}_x^2, x\right]\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix} = -\frac{i\hbar}{m}\hat{p}_x\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}.$$

Здесь использовались соотношения :

$$\left[\hat{p}_y, x\right] = \left[\hat{p}_z, x\right] = 0$$

и то, что единичная матрица коммутирует с любой другой матрицей.

Отсюда :

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

Это соответствует соотношениям для безспиновой частицы.

По аналогии вычислите компоненты оператора скорости $\hat{v}_y$ ***и*** $\hat{v}_z$***.***

Вычислим теперь оператор ускорения:

$$\hat{\boldsymbol{w}} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\,t}\,\hat{\boldsymbol{v}} \;=\; \frac{i}{\hbar}\left[\,\widehat{H}\,,\;\hat{\boldsymbol{v}}\,\right],$$

где

$$\hat{\boldsymbol{v}} = \frac{1}{m}\left(\hat{p}_x,\,\hat{p}_y,\,\hat{p}_z\right)\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}.$$

Для проекции на ось x вычисляем коммутатор :

$$\left[\,\widehat{H}\,,\;\hat{p}_x\right] = \left[\frac{1}{2\,m}\,\hat{\boldsymbol{p}}^2\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix} - \frac{e\hbar}{2\,mc}\left(\boldsymbol{H},\,\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right),\;\hat{p}_x\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}\right] =$$

$$= -\frac{e\hbar}{2\,mc}\left(\left[H_x,\,\hat{p}_x\right]\hat{\sigma}_x + \left[H_y,\,\hat{p}_x\right]\hat{\sigma}_y + \left[H_z,\,\hat{p}_x\right]\hat{\sigma}_z\right).$$

Далее определяем :

$$\left[H_\alpha,\,\hat{p}_x\right]\Psi = -i\hbar H_\alpha\frac{\partial\Psi}{\partial\,x} + i\hbar\frac{\partial}{\partial\,x}\left(H_\alpha\boldsymbol{\Psi}\right) = i\hbar\frac{\partial H_\alpha}{\partial\,x}\Psi,\quad \alpha = 1,\,2,\,3.$$

Отсюда находим :

$$\hat{w}_\alpha = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\,t}\,\hat{v}_\alpha = \frac{1}{m}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\,t}\,\hat{p}_\alpha = \frac{e\hbar}{2\,m^2c}\sum_{\beta=1}^{3}\frac{\partial H_\beta}{\partial\,x_\alpha}\hat{\sigma}_\beta = \frac{e\hbar}{2\,m^2c}\left(\frac{\partial H_x}{\partial\,x_\alpha}\hat{\sigma}_x + \frac{\partial H_y}{\partial\,x_\alpha}\hat{\sigma}_y + \frac{\partial H_z}{\partial\,x_\alpha}\hat{\sigma}_z\right)$$

Задача 6.17 ГКК

6.17. Найти волновые функции стационарных состояний и соответствующие им энергетические уровни нейтральной частицы, имеющей спин $s = 1/2$ и спиновый магнитный момент μ_0 (так что $\hat{\mu} = \mu_0\hat{\sigma}$), в однородном магнитном поле.

Как было найдено выше уравнение Паули для нейтральной частицы со спином 1/2 и магнитным моментом μ_0, когда однородное постоянное поле направлено вдоль оси z, можно записать так:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial\,t}\boldsymbol{\Psi} = \left(-\frac{\hbar^2}{2\,m}\Delta\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix} - \mu_0 H_z\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\right)\boldsymbol{\Psi}.$$

В покомпонентной записи имеем:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial\,t}\psi_1 \;=\; \left(-\frac{\hbar^2}{2\,m}\Delta - \mu_0 H_z\right)\psi_1\;,$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial\,t}\psi_2 \;=\; \left(-\frac{\hbar^2}{2\,m}\Delta + \mu_0 H_z\right)\psi_2\;.$$

Поскольку нас интересуют стационарные состояния частицы, то
решение для волновых функций можно искать в следующей форме :

$$\boldsymbol{\Psi}_{s_z=\frac{1}{2}} = \begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix}\psi_1 = A\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix}e^{i(\boldsymbol{k},\,\boldsymbol{x}) - i\omega_1 t},\quad \boldsymbol{\Psi}_{s_z=-\frac{1}{2}} = \begin{bmatrix}0\\ 1\end{bmatrix}\psi_2 = \begin{bmatrix}0\\ 1\end{bmatrix}Be^{i(\boldsymbol{k},\,\boldsymbol{x}) - i\omega_2 t}$$

Подставляя эти соотношения в уравнения, находим энергии двух возможных состояний :

$$E_1 = \hbar\omega_1 = \frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2\,m} - \hbar\Omega_L,\quad E_2 = \hbar\omega_2 = \frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2\,m} + \hbar\Omega_L,$$

Здесь E_1 *– энергия состояния со спином, направленным в положительном направлении оси z, а*

E_2 *– энергия состояния со спином, направленным в отрицательном направлении оси z.*

а $\Omega_L = \dfrac{\mu_0 H_z}{\hbar}$ *– частота Лармора для частицы с магнитным моментом* μ_0.

Постоянные A и B определяются начальными условиями и условием нормировки волновой функции.

Поскольку частица, фактически движется без взаимодействия, т.е является волной де Бройля, то $A = \dfrac{1}{\sqrt{(2\,\pi\hbar)^3}}$, $B = \dfrac{1}{\sqrt{(2\,\pi\hbar)^3}}$

.

Здесь множитель $\dfrac{1}{\sqrt{(2\,\pi\hbar)^3}}$ *относится к пространственной нормировке волны де Бройля,*

В результате окончательно находим :

$$\boldsymbol{\Psi}_{s_z=\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{(2\,\pi\hbar)^3}}\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix}e^{i(\boldsymbol{k},\,\boldsymbol{x}) - i\omega_1 t},\quad \boldsymbol{\Psi}_{s_z=-\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{(2\,\pi\hbar)^3}}\begin{bmatrix}0\\ 1\end{bmatrix}Be^{i(\boldsymbol{k},\,\boldsymbol{x}) - i\omega_2 t}$$

Задача 7.41 ГКК

7.41. Найти зависимость от времени спиновой волновой функции и средних значений компонент спина нейтральной частицы со спином $s = 1/2$ и магнитным моментом μ, находящейся в однородном стационарном магнитном поле.

Как было найдено выше, уравнение Паули для нейтральной частицы со спином 1/2, когда однородное постоянное поле направлено вдоль оси z, можно записать так:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{\Psi} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix} - \frac{e\hbar}{2mc}H_z\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\right)\mathbf{\Psi}.$$

В покомпонентной записи имеем:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_1 = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e\hbar}{2mc}H_z\right)\psi_1\ ,$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_2 = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{e\hbar}{2mc}H_z\right)\psi_2\ .$$

Каждое из последних уравнений решается отдельно.

Решение для волновых функций можно искать в следующей форме :

$$\psi_1 = Ae^{i(\mathbf{k},\mathbf{x}) - i\omega_1 t},\quad \psi_2 = Be^{i(\mathbf{k},\mathbf{x}) - i\omega_2 t}$$

Подставляя эти соотношения в уравнения, находим :

$$E_1 = \hbar\omega_1 = \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m} - \hbar\Omega_L,\quad E_2 = \hbar\omega_2 = \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m} + \hbar\Omega_L,$$

Здесь E_1 *и* E_2 *– полные энергии частицы с различными состояниями спина вдоль оси z,*

а $\Omega_L = \frac{e}{2mc}H_z$ *– частота Лармора.*

Постоянные A и B определяются начальными условиями и условием нормировки волновой функции.

Поскольку частица фактически движется без взаимодействия, т.е является волной де Бройля, то $A = \frac{a}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}$, $B = \frac{b}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}$

. Здесь множитель $\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}$ *относится к пространственной нормировке волны де Бройля, числа a и b к нормировке спинора, т.е. нормировке внутреннего состояния частицы.*

Пусть в начальный момент состояние частицы является смешанным, т.е.

имеется некоторая вероятность обнаружить частицу в состоянии с проекцией спина $s_z = \frac{1}{2}$ *и*

$s_z = -\frac{1}{2}$ *с вероятностями* $p_1 = a^2$, *и* $p_2 = b^2$. *Поскольку состояний два, то* $a^2 + b^2 = 1$.

Положим формально : $a = \cos(\alpha)$, $b = \sin(\alpha)$, *где* α *– число, определяемое в начальный момент времени.*

В результате окончательно находим :

$$\mathbf{\Psi} = \begin{bmatrix}\cos(\alpha)e^{-i\omega_1 t}\\ \sin(\alpha)e^{-i\omega_2 t}\end{bmatrix}e^{i(\mathbf{k},\mathbf{x})}$$

Вычислим теперь средние значения компонент спина в этом состоянии:

$$\langle\hat{s}_x\rangle = (\Psi,\ \hat{s}_x\ \mathbf{\Psi}),$$
$$\langle\hat{s}_y\rangle = (\Psi,\ \hat{s}_y\ \mathbf{\Psi}),$$
$$\langle\hat{s}_z\rangle = (\Psi,\ \hat{s}_z\ \mathbf{\Psi}).$$

$$\langle\hat{s}_x\rangle = (\Psi,\ \hat{s}_x\ \mathbf{\Psi}) = \frac{1}{2}\begin{bmatrix}\cos(\alpha)e^{i\omega_1 t} & \sin(\alpha)e^{i\omega_2 t}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\cos(\alpha)e^{-i\omega_1 t}\\ \sin(\alpha)e^{-i\omega_2 t}\end{bmatrix} =$$

$$= \frac{1}{2}\begin{bmatrix}\sin(\alpha)e^{i\omega_2 t} & \cos(\alpha)e^{i\omega_1 t}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\cos(\alpha)e^{-i\omega_1 t}\\ \sin(\alpha)e^{-i\omega_2 t}\end{bmatrix} = \frac{1}{2}\sin(\alpha)\cos(\alpha)\left(e^{i(\omega_2 - \omega_1)t} + e^{-i(\omega_2 - \omega_1)t}\right) =$$

$$= \sin(\alpha)\cos(\alpha)\cos((\omega_2 - \omega_1)t) = \frac{1}{2}\sin(2\alpha)\cos((\omega_2 - \omega_1)t)$$

По аналогии вычислите остальные средние значения компонент оператора спина $\hat{s}$ ***.***

Задача 6.18 ГКК

6.18. Найти энергетические уровни и волновые функции стационарных состояний дискретного спектра поперечного движения нейтрона в магнитном поле соленоида.

Будем полагать, что внутри соленоида поле однородно и направлено вдоль оси z. Будем также предполагать, что соленоид в сечении представляет собой прямоугольник со сторонами 2a и 2b. Нас интересуют стационарные состояния, поэтому будем решать стационарное уравнение Паули:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix} - \mu_0 H_z(x,y)\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\right)\boldsymbol{\Psi} = \boldsymbol{E}\,\boldsymbol{\Psi}$$

В покомпонентной записи :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \mu_0 H_z(x,y)\right)\psi_1 = \boldsymbol{E}\psi_1$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \mu_0 H_z(x,y)\right)\psi_2 = E\psi_2$$

По условию задачи движения вдоль соленоида нет.
Поэтому решение для волновых функций можно искать в следующей форме :

$$\Psi_{s_z=\frac{1}{2}} = \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}\psi_1(x,y), \quad \Psi_{s_z=-\frac{1}{2}} = \begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}\psi_2(x,y).$$

Функции $\psi_1(x,y)$ *и* $\psi_2(x,y)$ *являются теперь решениями уравнения Шредингера для частицы с потенциалами* :

$$U_1(x,y) = -\mu_0 H_z(x,y), \quad U_2(x,y) = +\mu_0 H_z(x,y)$$

Поскольку мы имеем дело с соленоидом с прямоугольным сечением, то магнитное поле удовлетворяет условиям :

$$H_z(x,y) = \begin{cases} 0\,, & x < -a,\ x > a,\quad y < -b, y > b;\\ H_0, & -a \le x \le a,\quad -b \le y \le b.\end{cases}$$

В результате решение распадается на решение задачи о частице в одномерной яме конечной глубины по каждой из координат для частицы со спином $s_z = \frac{1}{2}$ *и барьером для частицы со спином* $s_z = -\frac{1}{2}$

(при условии $H_0 > 0$*). Следовательно, только для частицы с* $s_z = \frac{1}{2}$ *будут существовать состояния внутри ямы с энергиями* :

$$E_{nm} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_n^{\ 2} + q_m^{\ 2}\right),\ m,\ n = 1,\ 2,...$$

где числа k_n *и* q_m *находятся из решения задачи о яме конечной глубины по каждой координате.*

Эти решения были найдены в задании 3 .

Обозначим решения вдоль оси x через $\psi_n(x)$*, а решения вдоль оси y через* $\phi_m(y)$.

Тогда волновая функция частицы для энергии E_{nm} *будет иметь такой вид* :

$$\Psi_{s_z=\frac{1}{2}} = \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}\psi_n(x)\phi_m(y),\ m,\ n = 1,\ 2,....$$

Частицы со спином $s_z = -\frac{1}{2}$ *будут отражаться от барьера или проходить через него.*

Соответствующие решения были найдены в задании 4

ЗАДАЧИ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОГО РЕШЕНИЯ

Задача 6.20 ГКК

6.20. В полупространстве $x > 0$ имеется однородное магнитное поле вида $\mathscr{H}_x = \mathscr{H}_y = 0$, $\mathscr{H}_z = \mathscr{H}_0$. В области $x < 0$ магнитное поле отсутствует. Найти коэффициент отражения поляризованных нейтронов (т. е. нейтронов с определенным значением проекции спина на ось z) от поверхности раздела.

Рассмотреть случаи падения нейтрона как из области пространства, где имеется магнитное поле, так и из области, свободной от магнитного поля. Найти соотношения между углами падения, отражения и преломления. Падающие нейтроны имеют определенный импульс **p**.

>

Задачи 6.19 ГКК

6.19. Нейтрон находится в стационарном магнитном поле вида

$$\mathscr{H}_\rho = \mathscr{H}_\varphi = 0, \quad \mathscr{H}_z = \mathscr{H}(\rho)$$

(цилиндрическая система координат). Свести задачу нахождения волновых функций стационарных состояний нейтрона и соответствующих им энергетических уровней к решению одномерного волнового уравнения.