ЖЭТФ, 2018, том 154, вып. 3 (9), стр. 557–559

СООТНОШЕНИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ ДЛЯ РАДИАЛЬНОГО ИМПУЛЬСА И РАДИАЛЬНОЙ КООРДИНАТЫ В КУЛОНОВСКОМ ПОТЕНЦИАЛЕ

А. М. Ишханян [a,b], ***В. П. Крайнов*** [c*]

[a] *Российско-Армянский университет*
0051, Ереван, Армения

[b] *Томский политехнический университет*
634050, Томск, Россия

[c] *Московский физико-технический институт (государственный университет)*
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 10 мая 2018 г.

Получены соотношения неопределенностей для произвольных состояний атома водорода. Показано, что для круговых ридберговских состояний достигается минимальное значение соотношения неопределенностей $\Delta p_r \Delta r \to \hbar/2$.

DOI: 10.1134/S0044451018090109

Хорошо известны соотношения неопределенностей в одномерных задачах квантовой механики: $\Delta p_x \Delta x \geq \hbar/2$ [1]. Цель данной работы — получить аналогичные соотношения в центральном потенциале и рассмотреть наиболее интересный случай кулоновского потенциала. Обозначим через R нормированную вещественную радиальную волновую функцию связанного состояния с квантовыми числами n, l. В центральном потенциале эрмитов оператор радиального импульса имеет вид [2]

$$\hat{p}_r = -i\left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r}\right).$$

Уравнение Шредингера для радиальной функции имеет вид (всюду $\hbar = m = 1$)

$$\hat{p}_r^2 R(r) = k^2(r) R(r), \quad k^2 = 2\left[E - U_{eff}(r)\right],$$
$$U_{eff}(r) = U(r) + \frac{l(l+1)}{2r^2}, \quad \int_0^\infty r^2 dr\, R^2(r) = 1. \tag{1}$$

Определим среднее значение координаты и ее флуктуации:

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty R^2(r) r^3 dr, \quad \delta r = r - \langle r \rangle. \tag{2}$$

Покажем, что среднее значение эрмитова оператора радиального импульса равно нулю. Будем обозначать штрихом дифференцирование по радиальной координате. Получаем

$$i\langle \hat{p}_r \rangle = \int_0^\infty r^2 dr\, R\left(R' + \frac{R}{r}\right) = \int_0^\infty r^2 dr\, R' R +$$
$$+ \int_0^\infty r\, dr\, R^2 = -\int_0^\infty dr\, R(r^2 R)' + \int_0^\infty r\, dr\, R^2 =$$
$$= -\int_0^\infty r^2 dr\, R\left(R' + \frac{R}{r}\right) = 0, \tag{3}$$

так как величина среднего значения радиального импульса получилась равной сама себе с противоположным знаком. Итак, оператор флуктуации радиального импульса равен самому оператору импульса: $\delta \hat{p}_r = \hat{p}_r$.

Следуя методу Вейля [1], рассмотрим вспомогательный интеграл

$$I(\alpha) = \int_0^\infty r^2 dr |(\alpha \delta r - i\hat{p}_r) R|^2 \geq 0. \tag{4}$$

* E-mail: vpkrainov@mail.ru

Его можно переписать в вещественной форме:

$$I(\alpha) = \int_0^\infty r^2 dr \left\{ \alpha R \delta r - R' - \frac{R}{r} \right\} \times \\ \times \left\{ \alpha R \delta r - R' - \frac{R}{r} \right\} \geq 0. \quad (5)$$

Вычисляем три отдельных слагаемых этого интеграла:

$$I_1(A) = \alpha^2 \int_0^\infty r^2 dr\, R^2(r) (\delta r)^2 = \alpha^2 \langle \delta r^2 \rangle. \quad (6)$$

Далее,

$$I_2(\alpha) = \int_0^\infty r^2 dr \left(R' + \frac{R}{r} \right)^2 = \\ = \int_0^\infty dr \left\{ r^2 R'^2 + 2rRR' + R^2 \right\} = \\ = \int_0^\infty dr \left\{ -R(r^2 R')' + 2rRR' + R^2 \right\} = \\ = \int_0^\infty dr \left\{ -r^2 RR'' + R^2 \right\} = \\ = -\int_0^\infty r^2 dr\, R \left(R'' + \frac{2}{r} R' \right) = \langle \delta \hat{p}_r^2 \rangle. \quad (7)$$

При этом было использовано, что

$$\int_0^\infty r\, dr\, RR' = -\int_0^\infty dr\, R(rR)' = \\ = -\int_0^\infty r\, dr\, RR' - \int_0^\infty dr\, R^2, \quad (8)$$

$$2\int_0^\infty r\, dr\, RR' = -\int_0^\infty dr\, R^2.$$

Наконец, третий интеграл имеет вид (с учетом (3))

$$I_3(\alpha) = -2\alpha \int_0^\infty r^2 dr \left\{ R(r - \langle r \rangle) \left(R' + \frac{R}{r} \right) \right\} = \\ = -2\alpha \int_0^\infty r^3 dr\, R \left(R' + \frac{R}{r} \right) = \\ = -2\alpha \int_0^\infty r^3 dr\, RR' - 2\alpha. \quad (9)$$

Так как

$$\int_0^\infty r^3 dr\, RR' = -\int_0^\infty dr\, R(r^3 R)' = \\ = -\int_0^\infty r^3 dr\, RR' - 3, \quad (10)$$

$$\int_0^\infty r^3 dr\, RR' = -\frac{3}{2},$$

то из (9) находим, что $I_3(\alpha) = \alpha$.

Итак, интеграл (5) равен

$$I(\alpha) = \alpha^2 \langle \delta r^2 \rangle + \alpha + \langle \delta \hat{p}_r^2 \rangle \geq 0. \quad (11)$$

Это выражение можно переписать в виде

$$\left\{ \alpha \sqrt{\langle \delta r^2 \rangle} + \frac{1}{2\sqrt{\langle \delta r^2 \rangle}} \right\}^2 - \frac{1}{4\langle \delta r^2 \rangle} + \langle \delta \hat{p}_r^2 \rangle \geq 0, \quad (12)$$

откуда получаем соотношение неопределенностей

$$\langle \delta \hat{p}_r^2 \rangle \langle \delta r^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (13)$$

Определим волновую функцию, для которой достигается знак равенства в (13). Из (12) находим

$$\alpha = -\frac{1}{2\langle \delta r^2 \rangle}. \quad (14)$$

Согласно (4) и (14) получаем уравнение

$$\left(\frac{r - \langle r \rangle}{2\langle \delta r^2 \rangle} + \frac{d}{dr} + \frac{1}{r} \right) R(r) = 0. \quad (15)$$

Его решение имеет вид

$$R(r) = \frac{C}{r} \exp\left[-\frac{(r - \langle r \rangle)^2}{4\langle \delta r^2 \rangle} \right]. \quad (16)$$

Оно имеет сингулярность в начале координат. Ей в принципе можно пренебречь, если $\langle r^2 \rangle \gg \langle \delta r^2 \rangle$, чтобы экспоненциальная малость погасила степенной рост.

Теперь рассмотрим состояния атома водорода. Для произвольного состояния nl атома водорода дисперсия координаты равна

$$\langle \delta r^2 \rangle = \frac{n^2(n^2+2) - l^2(l+1)^2}{4}. \quad (17)$$

При этом радиальные матричные элементы координаты и ее квадрата вычисляются методом обобщенной теоремы вириала Крамерса [3].

Обратимся теперь к дисперсии радиального импульса. Из (1) имеем

$$\langle \delta \hat{p}_r^2 \rangle = \langle \hat{p}_r^2 \rangle = 2\langle E_n \rangle + 2\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle - l(l+1)\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \\ = \frac{1}{n^2} - \frac{2l(l+1)}{n^3(2l+1)}.$$

Здесь матричные элементы от обратных степеней координаты вычисляются элементарно [4]. Для произведения неопределенностей получим

$$\langle \delta r^2 \rangle \langle \delta \hat{p}_r^2 \rangle = \left\{ \frac{n^2+2}{4} - \frac{l^2(l+1)^2}{4n^2} \right\} \times \\ \times \left[1 - \frac{2l(l+1)}{n(2l+1)} \right]. \quad (18)$$

Это выражение минимально при максимальном значении орбитального квантового числа $l = n-1$ (круговые орбиты):

$$\langle \delta r^2 \rangle \langle \delta \hat{p}_r^2 \rangle_{min} = \frac{2n+1}{4(2n-1)} > \frac{1}{4}. \quad (19)$$

При $n \to \infty$ оно действительно стремится к пределу $1/4$. Это утверждение, как было сказано выше, следует из неравенства

$$\langle r \rangle^2 = n^4 \gg \langle \delta r^2 \rangle = n^3/2, \quad n \gg 1. \quad (20)$$

Итак, для квазиклассических состояний при условии $\langle r \rangle^2 \gg \langle \delta r^2 \rangle$ достигается минимальное значение $\hbar^2/4$ в соотношении неопределенностей.

Работа выполнена при финансовой поддержке Армянского государственного научного комитета (грант №18RF-139), Армянского национального фонда науки и образования (грант №PS-4986), Российско-Армянского университета на средства МОН РФ, в рамках проекта «Ведущие российские исследовательские университеты» (грант №FTI_24_2016 Томского политехнического университета), Министерства образования и науки Российской Федерации (проект №3.873.2017/4.6) и РФФИ (грант №18-52-05006).

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Физматлит, Москва (2016).

2. З. Флюгге, *Задачи по квантовой механике*, т. 1, Мир, Москва (1974), задача 59.

3. В. В. Киселев, *Квантовая механика*, Московский центр непрерывного математического образования, Москва (2009).

4. Ю. М. Белоусов, С. Н. Бурмистров, А. И. Тернов, *Задачи по теоретической физике*, «Интеллект», Долгопрудный (2013).