Задачи к курсу квантовой механики

1. Стационарные состояния дискретного спектра уравнения Шрёдингера

1.1. ГКК 2.1

Найти энергетические уровни и нормированные волновые функции частицы в одномерной прямоугольной яме ширины a с бесконечно высокими стенками, т.е. в потенциале вида

$$U(x) = \begin{cases} +\infty & ; x < 0 \\ 0 & ; 0 < x < a \\ +\infty & ; x > a \end{cases} .$$

Определить для таких состояниях средние значения и флуктуации координаты и импульса частицы. В состоянии с волновой функцией $\Psi = Ax(x-a)$ (при $0 < x < a$), найти распределение вероятностей значений энергии и её среднее значение.

Ответ:

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2ma^2}\,; \quad \Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi n x}{a}\right)$$

где $n = 1, 2, ...$ — действительные числа. Средние значения и флуктуации в n–ом состоянии

$$\overline{x} = \frac{a}{2}\,, \quad \delta x = a\sqrt{\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2 n^2}}\,;$$

$$\overline{p} = 0\,, \quad \delta p = \frac{\pi\hbar n}{a}\,.$$

Нормировка заданной волновой функции даёт $A = \sqrt{30/a^5}$. Разложение заданной волновой функции по собственным функциям Гамильтониана

$$C_n = \int_0^a \Psi(x)\Psi_n^*(x)\,dx = -\frac{4\sqrt{15}}{\pi^3}\cdot\frac{1-(-1)^n}{n^3}$$

определяет вероятность нахождения частицы в n–ом состоянии: $w(E_n) = |C_n|^2$. В частности, $w(E_1) = 960/\pi^6 \simeq 0.9986$. Среднее значение энергии

$$\overline{E} = \int_0^a \Psi^*(x)\hat{H}\Psi(x)\,dx = \frac{5\hbar^2}{ma^2} = \frac{10}{\pi^2}E_1 \simeq 1.013E_1\,.$$

1.2.

Найти энергию и волновую функцию основного состояния частицы в двумерной потенциальной яме конечной глубины

$$U(\rho) = \begin{cases} 0 & ; \rho < a \\ -U_0 & ; \rho > a \end{cases} .$$

1.3. ГКК 2.15

Определить условия, при которых в одномерной потенциальной яме

$$U(x) = \begin{cases} U_1 & ; x < 0 \\ 0 & ; 0 < x < a, \\ U_2 & ; x > a \end{cases}$$

существуют локализованные состояния ($U_1, U_2 > 0$). Рассмотреть предельные случаи:

1. $U_1 \to \infty$;
2. $U_2 \to U_1$.

Ответ: Для определенности будем считать $U_2 < U_1$. Локализованным состояниям соответствуют $E < U_2$. Условие появления нового (в том числе и первого) локализованного состояния (не нарастающего при $x \to \pm\infty$) есть $E = U_2$, которое имеет вид

$$\operatorname{tg}\sqrt{\frac{2mU_2a^2}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{U_1}{U_2} - 1}\,,$$

причем порядковый номер уровня определяется из условия

$$\pi\left(N - \frac{3}{2}\right) < \sqrt{\frac{2mU_2a^2}{\hbar^2}} < \pi\left(N - \frac{1}{2}\right) .$$

Соответственно условие существования связанного состояния

$$\sqrt{\frac{2mU_2a^2}{\hbar^2}} > \operatorname{arctg}\sqrt{\frac{U_1}{U_2} - 1}\,.$$

В частности, при $U_1 \to \infty$ необходимо, чтобы $U_2 \geq \pi^2\hbar^2/8ma^2$, тогда как при $U_1 = U_2$ хотя бы одно локализованное состояние существуют всегда.

1.4.

Найти спектр частицы, находящейся в потенциале вида

$$U(x, y) = \frac{k(x^2 + y^2)}{2} + \alpha xy \qquad (|\alpha| < k)\,.$$

Ответ:

$$E_{n_1,n_2} = \hbar\omega_1(n_1 + 1/2) + \hbar\omega_2(n_2 + 1/2); \qquad \omega_{1,2} = \sqrt{\frac{k \pm \alpha}{m}}\,.$$

2. Вариационный метод решения стационарного уравнения Шрёдингера

Пусть $\Psi_\alpha(q)$ — нормированная пробная функция, α — вариационный параметр, тогда собственное значение энергии

$$E = \min_\alpha \int \Psi^*_\alpha(q)\hat{H}\Psi_\alpha(q)\,dq\,.$$

2.1.

Найти приближенное значение энергии основного состояния частицы в потенциальной яме вида $U(x) = \gamma|x|$, используя пробную функцию $\Psi(x) \sim \exp(-\alpha x^2/2)$.

2.2.

Найти приближенное значение энергии основного состояния частицы в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечными стенками:

$$U(x) = \begin{cases} 0 & ; 0 < x < a \\ \infty & ; x < 0, x > a \end{cases}\,,$$

используя пробные функции вида:

1) $\Psi(x) \sim x(x-a)$;
2) $\Psi(x) \sim \sin^2(\pi x/a)$.

Сравните результаты с точным решением.

2.3.

Оценить энергию основного состояния в одномерной потенциальной яме. Показать, что в мелкой одномерной потенциальной яме всегда существует связанное состояние. *Указание:* Использовать предположение, что характерный пространственный масштаб волновой функции a много больше характерного пространственного масштаба потенциальной ямы L ($a \gg L$).

2.4.

Найти приближенное значение энергии основного состояния частицы в потенциальной яме вида $U(x) = kx^2/2$ (гармонический осциллятор), используя пробные функции вида:

1) $\Psi_a(x) \sim \left[1 + x^2/a^2\right]^{-1}$;
2) $\Psi_a(x) \sim \left[1 + x^2/a^2\right]^{-2}$.

Сравните результат с точным решением.

2.5.

Для двумерной потенциальной ямы конечной глубины:

$$U(\rho) = \begin{cases} 0 & ;\rho < a \\ -U_0 & ;\rho > a \end{cases},$$

оценить энергию основного состояния используя пробные функции вида

1)

$$\Psi(\rho) \sim \begin{cases} \rho - a & ;\rho < a \\ 0 & ;\rho > a \end{cases};$$

2)

$$\Psi(\rho) \sim \begin{cases} \cos(\pi\rho/(2a)) & ;\rho < a \\ 0 & ;\rho > a \end{cases},$$

2.6.

Для сферически симметричного кулоновского потенциала $U(r) = -\gamma/r$ оценить энергию основного состояния, пользуясь пробными функциями вида:

1)

$$\Psi(r) \sim \begin{cases} r_0 - r & ;r < r_0 \\ 0 & ;r > r_0 \end{cases};$$

2) $\Psi(r) \sim \exp(-r^2/(2r_0^2))$,

где r_0 — вариационный параметр.

3. Уравнение Шрёдингера с дельта–функцией в потенциальной энергии

Пусть потенциальная энергия имеет вид:

$$U(x) = \tilde{U}(x) + \alpha\,\delta(x),$$

где $\tilde{U}(x)$ — кусочно–гладкая функция, $\delta(x)$ — дельта–функция, обладающая следующими свойствами:

1.

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty & ;x = 0 \\ 0 & ;x \neq 0 \end{cases};$$

2.

$$\int_a^b \delta(x)\,dx = \begin{cases} 1 & ;x \in [a,b] \\ 0 & ;x \ni [a,b] \end{cases};$$

3.

$$\int_a^b f(x)\delta(x)\,dx = \begin{cases} f(0) & ;x \in [a,b] \\ 0 & ;x \ni [a,b] \end{cases}.$$

Уравнение Шрёдингера с таким потенциалом имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2}+\left[\tilde{U}(x)+\alpha\,\delta(x)\right]\Psi=E\Psi. \tag{1}$$

Проинтегрируем уравнение в интервале $[-\varepsilon,\varepsilon]$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\Psi'(\varepsilon)-\Psi'(-\varepsilon)\right)+\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\tilde{U}(x)\Psi(x)\,dx+\alpha\Psi(0)=E\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\Psi(x)\,dx.$$

Устремив $\varepsilon\to 0$, получаем

$$\Psi'(0+0)-\Psi'(0-0)=\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\Psi(0). \tag{2}$$

Таким образом, можно решать уравнение Шрёдингера (1) справа и слева от точки $x=0$ и сшивать эти решения с помощью граничного условия (2).

3.1.

Найти энергию и волновую функцию локализованного состояния в потенциале $U(x)=-\alpha\delta(x)$.

3.2.

Найти собственные значения энергии и волновые функции частицы в потенциале $(\alpha>0)$

$$U(x)=\begin{cases}\alpha\delta(x) & ;|x|<a\\ \infty & ;|x|>a\end{cases}.$$

Отдельно рассмотрите случаи:

1. $m\alpha a/\hbar^2\gg 1$;
2. $mEa^2/\hbar^2\gg 1$;
3. $\alpha<0$.

3.3.

Частица находится в потенциале $(\alpha>0)$:

$$U(x)=\begin{cases}\infty & ;x<0\\ -\alpha\delta(x) & ;x>0\end{cases}.$$

Найти зависимость числа уровней дискретного спектра от глубины ямы $m\alpha a/\hbar^2$.

4. Туннелирование

4.1. ГКК 2.47

Определить коэффициенты отражения и прохождения частиц в случае δ–функционального потенциала $U(x)=\alpha\delta(x)$. Рассмотреть предельные случаи $E\to\infty$ и $E\to 0$.

4.2. ГКК 2.48

Найти коэффициент прохождения частиц через прямоугольный потенциальный барьер

$$U(x) = \begin{cases} 0 & ; x < 0 \\ U_0 & ; 0 < x < a \\ 0 & ; x > a \end{cases} .$$

Рассмотреть случаи $U_0 > 0$ и $U_0 < 0$.

4.3. ГКК 2.50

Найти значения энергии, при которых частицы не отражаются от потенциального барьера $U(x) = \alpha[\delta(x) + \delta(x + a)]$.

4.4. ГКК 2.54

Доказать, что для потенциального барьера произвольной формы выполняется соотношение

$$R(E) + T(E) = 1,$$

R и T — коэффициенты отражения и прохождения, соответственно. Рассмотреть потенциальный барьер наиболее общей формы

$$\lim_{x\to-\infty} U(x) = 0 \qquad \lim_{x\to+\infty} U(x) = U_0$$

5. Момент импульса

5.1. СбЗ 41

Найти коммутатор операторов проекций моментов импульса.
Ответ:

$$[\hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{L}}] = i\hbar\hat{\mathbf{L}} .$$

5.2. СбЗ 42

Найти коммутатор $[\hat{L}^2, \hat{L}_\alpha]$.
Ответ:

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_\alpha] = 0 .$$

5.3. ГКК 3.1

Выразить оператор поворота $\hat{R}$, описывающий преобразование волновой функции системы N частиц при вращении системы координат на угол φ_0 относительно оси, направление которой в пространстве определяется единичным вектором $\mathbf{n}_0$, через оператор момента импульса системы.
Ответ:

$$\hat{R} = \exp(i\hat{\mathbf{L}}\mathbf{n}_0\varphi_0) .$$

5.4. ГКК 3.14

В состоянии Ψ_{lm} с определенными значениями момента l и его проекции m на ось z найти среднее значение проекции момента на ось $\tilde{z}$, составляющую угол α с осью z.
Ответ:
$$\bar{l}_{\tilde{z}} = \hbar m \cos\alpha\,.$$

5.5. ГКК 3.7

Представить оператор момента системы двух частиц в виде двух слагаемых, описывающих момент частиц в системе центра инерции (момент относительного движения) и момента центра инерции системы.
Ответ:
$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{L}}_1 + \hat{\mathbf{L}}_2 = -i\hbar\left\{\left[\mathbf{r}_1 \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1}\right] + \left[\mathbf{r}_2 \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_2}\right]\right\} = -i\hbar\left\{\left[\mathbf{R} \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}}\right] + \left[\mathbf{r} \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\right]\right\}\,,$$
где
$$\mathbf{R} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}\,, \qquad \mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1\,.$$

5.6. ГКК 4.1 Плоский ротатор

Найти волновые функции стационарных состояний и собственные значения энергии плоского ротатора (вращающейся системы из двух жестко связанных друг с другом частиц). Момент инерции ротатора $I = \mu a^2$, где μ — приведенная масса частиц, a — расстояние между ними. Частицы вращаются в фиксированной плоскости. Какова кратность вырождения уровней.
Ответ:
$$E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2I}\,, \qquad \Psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}\,, \qquad m = 0, \pm 1, \pm 2, ...$$
Все уровни, кроме основного ($m = 0$), двукратно вырождены.

5.7. ГКК 4.3 Пространственный ротатор

Найти собственные значения энергии пространственного ротатора (вращающейся системы из двух жестко связанных друг с другом частиц). Момент инерции ротатора $I = \mu a^2$, где μ — приведенная масса частиц, a — расстояние между ними. Указать вид волновых функций стационарных состояний. Какова кратность вырождения уровней.
Ответ:
$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I}\,, \qquad \Psi_{lm}(\theta, \varphi) = Y_{lm}(\theta, \varphi)\,, \qquad l = 0, 1, 2, ... \qquad m = -l, -l+1, ..., l\,.$$
Здесь $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ — шаровые функции. Каждый уровень $(2l+1)$–кратно вырожден.

5.8.

Показать, что оператор $\hat{L}^2$ с точностью до множителя есть угловая часть лапласиана, записанного в сферической системе координат.

6. Частицы в центрально–симметричном поле

6.1. Атом водорода

Найти спектр энергии в атоме водорода.

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_p}\nabla_p^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_e^2 - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_e|}\,.$$

6.2. Сферические волны

Найти волновые функции свободно движущейся частицы в сферической системе координат.

6.3.

Найти электрический потенциал, создаваемый атомом водорода, находящимся в основном состоянии.
Ответ:

$$\phi(r) = e\left[\frac{1}{r} + \frac{1}{a}\right]e^{-2r/a}; \qquad a = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

7. Стационарная теория возмущений

7.1. ГКК 8.1

Для частицы, находящейся в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины a $(0 < x < a)$, найти в первом порядке теории возмущений смещение энергетических уровней под действием возмущения вида:

1)

$$V(x) = V_0(a - |2x - a|)/a\,;$$

2)

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & ; b < x < a - b \\ 0 & ; 0 < x < b, \quad a - b < x < a \end{cases}\,.$$

Ответ: $(n = 0, 1, 2, ...)$

1)

$$E_n^{(1)} = V_0\left[\frac{1}{2} + \frac{1 + (-1)^n}{\pi^2(n+1)^2}\right]\,;$$

2)

$$E_n^{(1)} = V_0\left[1 - \frac{2b}{a} + \frac{1}{\pi(n+1)}\sin\frac{2\pi(n+1)b}{a}\right]\,.$$

7.2. ГКК 8.5

На частицу в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины a $(0 < x < a)$ наложено возмущение вида

$$V(x) = V_0 \cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)$$

Рассчитать изменение энергетических уровней частицы в первых двух порядках теории возмущений.

Ответ:

$$V_{nm} = V_0 \begin{cases} 1/4 & ; n = m = 0 \\ 1/2 & ; n = m \neq 0 \\ 1/4 & ; n = m \pm 2 \\ 0 & ; \text{в остальных случаях} \end{cases},$$

$$E_n^{(1)} = V_{nn}\,, \qquad E_n^{(2)} = \frac{ma^2V_0^2}{96\pi^2\hbar^2} \begin{cases} -3/2 & ; n = 0 \\ -1 & ; n = 1 \\ 6/[n(n+2)] & ; n \geq 2 \end{cases},$$

7.3. ГКК 8.15

Частица находится внутри непроницаемого эллипсоида вращения, т.е.

$$U(x) = \begin{cases} 0 & ; (x^2+y^2)/a^2 + z^2/b^2 < 1 \\ \infty & ; (x^2+y^2)/a^2 + z^2/b^2 > 1 \end{cases},$$

причем $\varepsilon = (a-b)/a \ll 1$. Найти в первом порядке теории возмущений сдвиг энергетического уровня основного состояния частицы по отношению к уровню энергии частицы в непроницаемой сфере радиуса a.

Ответ:

$$E_0^{(0)} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\,; \qquad E_0^{(1)} = \varepsilon\frac{\hbar^2\pi^2}{3ma^2}\,.$$

7.4. ГКК 8.13

Найти расщепление первого возбужденного уровня энергии плоского симметричного гармонического осциллятора под действием возмущения вида $V = \alpha xy$ (плоскость (x,y) — плоскость колебаний) в первом порядке по теории возмущений.

Ответ:

$$V_{11} = V_{22} = 0; \quad V_{12} = V_{21} = \alpha a^2/2; \quad E_1^{(1,2)} = \pm V_{12}; \quad \Delta E = \alpha a^2; \quad a = \sqrt[4]{\frac{\hbar^2}{km}}\,,$$

где k — жесткость осциллятора, m — его масса.

8. Нестационарная теория возмущений

8.1. ГКК 8.23

На частицу, находящуюся при $t \to -\infty$ в основном состоянии в бесконечно глубокой яме с прямоугольными стенками (ширина ямы a), накладывается слабое однородное поле, изменяющееся во времени по закону:

$$V(x,t) = -xF_0 f(t)\,;$$

1) $f(t) = \exp(-t^2/\tau^2)$;
2) $f(t) = \exp(-|t|/\tau)$;
3) $f(t) = [1 + t^2/\tau^2]^{-1}$.

Вычислить в первом порядке теории возмущений вероятности возбуждения различных состояний частиц при $t \to +\infty$.
Ответ: Отличны от нуля матричные элементы для нечетных n ($n = 0, 1, 2, ...$):

$$V_{n0}(t) = F_0 f(t) e^{i\omega_{n0}t} \cdot \frac{8a}{\pi^2} \frac{n+1}{n^2(n+2)^2}; \qquad W_{0\to n} = \frac{64a^2F_0^2(n+1)^2}{\pi^2\hbar^2 n^4(n+2)^4} I_k^2$$

$$I_k = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{i\omega_{no}t}\, dt; \qquad \begin{array}{l} I_1 = \sqrt{\pi}\tau e^{-\omega_{no}^2\tau^2/4} \\ I_2 = \frac{2\tau}{1+\omega_{no}^2\tau^2} \\ I_3 = \pi\tau e^{-\omega_{no}\tau} \end{array}.$$

8.2. ГКК 8.26

На плоский ротатор, имеющий дипольный момент $\mathbf{p}$, наложено однородное электрическое поле меняющееся по времени $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 f(t)$. До включения поля ротатор находился имел определенное значение проекции m момента импульса. Вычислить в первом порядке теории возмущений вероятности различных значений проекции момента импульса и энергии ротатора при $t \to +\infty$ для $f(t)$ вида:

1) $f(t) = \exp(-t^2/\tau^2)$;
2) $f(t) = \exp(-|t|/\tau)$;
3) $f(t) = [1 + t^2/\tau^2]^{-1}$.

Ответ: Отличны от нуля матричные элементы для переходов $m \to m \pm 1$:

$$W_{m\to m\pm1} = \frac{p^2E_0^2}{\hbar^2 4} I_k^2; \qquad \omega_{m\pm1,m} = \frac{\hbar^2}{2I}(1 \pm 2m)\,.$$

9. Формализм спина $s = 1/2$

9.1. ГКК 5.1

Найти собственные значения и собственные функции операторов проекций спина для частицы со спином $s = 1/2$.

9.2. ГКК 5.2

Указать вид оператора проекции спина $\hat{s}_{\mathbf{n}}$ на произвольное направление, задаваемое единичным вектором $\mathbf{n}_0$. Найти среднее значение проекции спина на ось $\mathbf{n}_0$ в состоянии с определенной проекцией спина на ось z.

9.3. ГКК 5.3

Найти собственные значения оператора $f = a + \mathbf{b}\hat{\vec{\sigma}}$ (a — число, $\mathbf{b}$ — вектор, $\hat{\vec{\sigma}}$ — матрицы Паули).
Ответ:

$$\lambda = a \pm b\,.$$

9.4. ГКК 5.5

Произвольный линейный оператор $\hat{L}$, действующий в пространстве спиновых переменных для частиц с $s = 1/2$, является квадратной матрицей 2–го ранга. Какие ограничения накладывает эрмитовость оператора $\hat{L}$ на элементы этой матрицы? Найти собственные значения такого эрмитова оператора.
Ответ:

$$\hat{L} = \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & c \end{pmatrix} ; \qquad l_{1.2} = \frac{a+c}{2} \pm \sqrt{\frac{(a-c)^2}{4} + |b^2|}\,,$$

где a, c — действительные числа, b — комплексное число.