

1 Вариационный метод решения стационарного уравнения Шредингера

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

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

1.1

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

1.2

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.

1.3

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 ($a \gg L$).

1.4

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

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

Сравните результат с точным решением.

1.5

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)

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

1.6

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.

2 Стационарные состояния дискретного спектра уравнения Шредингера

2.1

Найти давление, с которым частица, находящаяся в n -ом состоянии в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками, действует на стенки ямы.

2.2

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

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

2.3

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. Рассмотреть предельные случаи:

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

2.4

Найти спектр частицы, находящейся в потенциале вида

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

Ответ:

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

3 Уравнение Шредингера 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 Шредингера с таким потенциалом имеет вид

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

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

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

Устремив $\varepsilon \rightarrow 0$, получаем

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

Таким образом, можно решать уравнение Шредингера (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 $E \rightarrow \infty$ и $E \rightarrow 0$.

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 ГKK 2.50

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

4.4 ГKK 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

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} U(x) = 0 \quad \lim_{x \rightarrow +\infty} U(x) = U_0$$

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 ГKK 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 ГKK 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

$$\mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1.$$

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:

$$E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2I}, \quad \Psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

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:

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I}, \quad \Psi_{lm}(\theta, \varphi) = Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad m = -l, -l+1, \dots, l.$$

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:

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

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: ($n = 0, 1, 2, \dots$)

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:

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

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

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:

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

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

$$V(x, t) = -xF_0f(t);$$

- 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 $t \rightarrow +\infty$.

Ответ: Отличны от нуля матричные элементы для нечетных n ($n = 0, 1, 2, \dots$):

$$V_{n0}(t) = F_0f(t)e^{i\omega_{n0}t} \cdot \frac{8a}{\pi^2} \frac{n+1}{n^2(n+2)^2}; \quad W_{0 \rightarrow n} = \frac{64a^2F_0^2(n+1)^2}{\pi^2\hbar^2n^4(n+2)^4} I_k^2$$

$$I_k = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)e^{i\omega_{n0}t} dt; \quad \begin{aligned} I_1 &= \sqrt{\pi}\tau e^{-\omega_{n0}^2\tau^2/4} \\ I_2 &= \frac{2\tau}{1+\omega_{n0}^2\tau^2} \\ I_3 &= \pi\tau e^{-\omega_{n0}\tau} \end{aligned}.$$

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 $t \rightarrow +\infty$ 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 $m \rightarrow m \pm 1$:

$$W_{m \rightarrow m \pm 1} = \frac{p^2 E_0^2}{\hbar^2 4} I_k^2, \quad \omega_{m \pm 1, m} = \frac{\hbar^2}{2I} (1 \pm 2m).$$

9 Формализм спина $s = 1/2$

9.1 ГКК 5.1

Найти собственные значения и собственные функции частицы со спином $s = 1/2$ и определенной проекцией спина на оси x, y, z .

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 $f = a + \mathbf{b} \hat{\sigma}$ (a — число, \mathbf{b} — вектор, $\hat{\sigma}$ — матрицы Паули).

Ответ:

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

9.4 ГКК 5.5

Произвольный линейный оператор \hat{L} , действующий в пространстве спиновых переменных 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:

$$\hat{L} = \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & c \end{pmatrix}; \quad l_{1,2} = \frac{a+c}{2} \pm \sqrt{\frac{(a-c)^2}{4} + |b|^2},$$

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