# 1. Линейные операторы: примеры и свойства. Коммутатор. Обратные операторы

1.1. Вычислить операторные выражения:

$$\text{(a) } \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + x\right)^2; \qquad \text{(b) } \left[x^2, \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right]; \qquad \text{(c) } \left[x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}, \frac{1}{x}\right].$$

1.2. Операторы $\hat{L}$ и $\hat{M}$ удовлетворяет условию $[\hat{M}, \hat{L}] = 1$. Вычислить коммутаторы:

$$\text{(a) } [\hat{M}^n, \hat{L}]; \qquad \text{(b) } [f(\hat{M}), \hat{L}].$$

**Замечание:** $f(\hat{M}) = f(0) + f'(0)\hat{M} + \frac{f''(0)}{2!}\hat{M}^2 + \frac{f'''(0)}{3!}\hat{M}^3 + \ldots$

1.3. Вычислить обратный оператор $\hat{A}^{-1}$, если:

$$\text{(a) } \hat{A} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - k,\ k = \mathrm{const}; \qquad \text{(b) } \hat{A}\varphi(x) = \int\limits_{-\infty}^{x} \frac{\mathrm{d}y}{y}\varphi(y).$$

## Домашнее задание 1.

1.4. Вычислить операторные выражения:

$$\text{(a) } \left(x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^2; \qquad \text{(b) } \left[\frac{1}{x} + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}, x^2\right]; \qquad \text{(c) } \left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}, \sin(x)\right];$$

1.5. Даны три оператора $\hat{A}$, $\hat{B}$ и $\hat{C}$. Доказать следующие соотношения:

(a) $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$;

(b) $\big[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]\big] + \big[\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]\big] + \big[\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]\big] = 0$ (соотношение Якоби);

(c) $e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!}\big[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]\big] + \frac{1}{3!}\Big[\hat{A}, \big[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]\big]\Big] + \ldots$;

**Замечание:** $e^{\hat{A}} = \hat{1} + \hat{A} + \frac{1}{2!}\hat{A}^2 + \frac{1}{3!}\hat{A}^3 + \ldots$

(d) $(\hat{A}\hat{B})^{-1} = \hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1}$.

1.6. Предполагая $\lambda$ малой величиной, найти разложение оператора $(\hat{A} - \lambda\hat{B})^{-1}$ по степеням $\lambda$.

## 2. Эрмитово сопряженные линейные операторы. Эрмитовы операторы.

2.1. Вычислить эрмитово сопряженный оператор $\hat{L}^\dagger$, где $\hat{L}$ определен следующим образом:

$$\text{(a)}\ \hat{L}f(x) = \frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x};\quad \text{(b)}\ \hat{L}\varphi(x) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y L(x,y)\varphi(y);\quad \text{(c)}\ (\hat{L}\phi)_n = \sum_m L_{n,m}\phi_m.$$

2.2. Ядро $L(x,y)$ оператора $\hat{L}$ (см. 2.1b) является функцией вида:

(a) $L(x,y) = f(x+y)$; (b) $L(x,y) = g(x-y)$; (c) $L(x,y) = h(x)l(y)$.

Какие ограничения на функции $f(x)$, $g(x)$, $h(x)$ и $l(x)$ вытекают из эрмитовости оператора $\hat{L}$?

2.3. Доказать, что произвольный оператор $\hat{L}$ можно представить в следующем виде: $\hat{L} = \hat{M} + i\hat{N}$, где $\hat{M}$ и $\hat{N}$ — некоторые эрмитовы операторы, называемые эрмитовой и антиэрмитовой частями оператора $\hat{L}$, соответственно.

**Замечание:** Покажите, что $\hat{M} = \hat{L} + \hat{L}^\dagger$ и $\hat{N} = i(\hat{L}^\dagger - \hat{L})$ — эрмитовы для произвольного $\hat{L}$.

### Домашнее задание 2.

2.4. Вычислить эрмитово сопряженный оператор $\hat{L}^\dagger$, где $\hat{L}$:

(a) $\hat{L} = \hat{I}$ — оператор отражения, $\hat{I}\psi(x) = \psi(-x)$;

(b) $\hat{L} = \hat{T}_a$ — оператор сдвига, $\hat{T}_a\psi(x) = \psi(x+a)$;

(c) $\hat{L} = \hat{C}$ — оператор комплексного сопряжения, $\hat{C}\psi(x) = \psi^*(x)$;

(d) $\hat{L} = \dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$; (e) $\hat{L} = \Big(x + \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Big)^2$.

2.5. Для произвольных операторов $\hat{L}$ и $\hat{M}$ доказать, что:

(a) $\big(\hat{L}^\dagger\big)^\dagger = \hat{L}$; (b) $\big(\hat{L}\hat{M}\big)^\dagger = \hat{M}^\dagger\hat{L}^\dagger$; (c) $\big(\hat{L}^{-1}\big)^\dagger = \big(\hat{L}^\dagger\big)^{-1}$;

(d) $\hat{L}\hat{L}^\dagger$, $\hat{L}^\dagger\hat{L}$ и $[\hat{L},\hat{L}^\dagger]$ — эрмитовы операторы;

(e) если $\hat{L}$ — эрмитов, то $\hat{M}\hat{L}\hat{M}^\dagger$ также эрмитов.

(f) если $\hat{L}$ и $\hat{M}$ — эрмитовы, то операторы $\hat{L}\hat{M} + \hat{M}\hat{L}$ и $i\big(\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L}\big)$ также эрмитовы.

# 3. Собственные функции и собственные числа операторов. Средние значения.

3.1. Определить собственные значения и нормированные собственные функции (векторы) оператора $\hat{L}$:

(a) $\hat{L} = x + \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$; (b) $\hat{L} = \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & c \end{pmatrix}$; (c) $\hat{L} = \dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$.

**Замечание:** $\displaystyle\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\mathrm{d}x = \sqrt{\pi}, \qquad \frac{1}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}\mathrm{d}x = \delta(k).$

3.2. Вычислить средние значения

(a) $\bar{x}$ — координаты; (b) $\bar{p}$ — импульса;

(c) $\overline{x^2}$ — квадрата координаты; (d) $\overline{p^2}$ — квадрата импульса

для волнового состояния системы, описываемого собственными функциями оператора $\hat{L} = x + \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ из задачи 3.1a.

**Замечание:** Оператор импульса определен выражением $\hat{p} = -i\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$.

## Домашнее задание 3.

3.3. Определить собственные значения и нормированные собственные функции (векторы) оператора $\hat{L}$:

(a) $\hat{L} = 1 + 2x + \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$; (b) $\hat{L} = \begin{pmatrix} 1 & i \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$; (c) $\hat{L} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$; (d) $\hat{L} = x\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + x^2$.

**Замечание:** $\displaystyle\int\limits_{-\infty}^{\infty} x^a e^{-x^2}\mathrm{d}x = \frac{1+e^{ia\pi}}{2}\Gamma\Big[\frac{1+a}{2}\Big], \quad \mathrm{Re}\, a > -1.$

3.4. Вычислить средние значения (a) $\overline{\left(x-\bar{x}\right)^2}$; (b) $\overline{\left(p-\bar{p}\right)^2}$ для волнового состояния системы, описываемого собственными функциями оператора $\hat{L} = x + \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ из задачи 3.1a.

3.5. Показать, что для волнового состояния частицы $\psi(x) = C\exp(ip_0x/\hbar)\phi(x)$, где $\phi(x)$ — вещественная функция, средний импульс равен $p_0$.

3.6. Показать, что средние значения операторов $\hat{L}\hat{L}^\dagger$ и $\hat{L}^\dagger\hat{L}$ ($\hat{L}$ — некоторый оператор) в произвольном волновом состоянии неотрицательны.

3.7. Эрмитов оператор $\hat{M}$ удовлетворяет соотношению $\hat{M}^2 = c\hat{M}$, где $c$ — некоторое вещественное число. Каковы возможные собственные значения оператора $\hat{M}$?

# 4. Элементы теории представлений. Импульсное представление.

4.1. Нормировать волновую функцию $\psi(x)$ и вычислить ее импульсное представление:

(a) $\psi(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, x > x_0, \\ C \sin \dfrac{\pi n x}{x_0}, & 0 \leqslant x \leqslant x_0; \end{cases}$ $\qquad n$ — целое число;

(b) $\psi(x) = C \exp\left[\dfrac{ip_0 x}{\hbar} - \dfrac{(x-x_0)^2}{2a^2}\right].$

**Замечание:** Из формулы Эйлера: $\sin kx = \dfrac{e^{ikx} - e^{-ikx}}{2i}$.

4.2. Определить $p$-представление оператора $\hat{L}_p$, заданного в $x$-представлении следующим образом:

(a) $\hat{L}_x = \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$; $\qquad$ (b) $\hat{L}_x \varphi(x) = \displaystyle\int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y L(x,y)\varphi(y).$

## Домашнее задание 4.

4.3. Нормировать волновую функцию $\psi(x)$ и вычислить ее импульсное представление:

(a) $\psi(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, x > \pi, \\ C \sin^2 3x, & 0 \leqslant x \leqslant \pi; \end{cases}$

(b) $\psi(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ Cx \exp\left[\dfrac{ip_0 x}{\hbar} - \dfrac{x}{x_0}\right], & x \geqslant 0. \end{cases}$

**Замечание:** Из формулы Эйлера: $\cos kx = \dfrac{e^{ikx} + e^{-ikx}}{2}$.

4.4. Определить $p$-представление оператора $\hat{L}_p$, заданного в $x$-представлении следующим образом:

(a) $\hat{L}_x = x$; $\qquad$ (b) $\hat{L}_x = \dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$; $\qquad$ (c) $\hat{L}_x \varphi(x) = \displaystyle\int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y L(x,y)\varphi(y).$

# 5. Одномерное движение. Бесконечно-глубокая потенциальная яма.

5.1. Частица массы $m$ движется в одномерном потенциале

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

(a) Определить волновые функции стационарных состояний и спектр энергии частицы.

(b) Вычислить волновую функцию $\psi(x,t)$ нестационарного состояния частицы, если

$$\psi(x, t=0) = \begin{cases} Ax(x-a), & 0 \leqslant x \leqslant a, \\ 0, & x < 0, x > a. \end{cases}$$

5.2. Определить среднее значение кинетической энергии в состоянии, описываемым $\psi(x, t=0)$ из задачи 5.1b.

**Замечание:** Оператор кинетической энергии $\hat{T} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m}$.

## Домашнее задание 5.

5.3. Частица движется в одномерном потенциале

$$U(x) = \begin{cases} 0, & |x| \leqslant x_0, \\ \infty, & |x| > x_0. \end{cases}$$

(a) Определить волновые функции стационарных состояний и спектр энергии частицы.

(b) Вычислить волновую функцию $\psi(x,t)$ нестационарного состояния частицы, если

$$\psi(x, t=0) = \begin{cases} B\left(x^2 - x_0^2\right)^2, & |x| \leqslant x_0, \\ 0, & |x| > x_0. \end{cases}$$

5.4. Определить среднее значение кинетической энергии в *произвольный* момент времени $t$ в состоянии, описываемым $\psi(x,t)$ из задачи 5.3b.

## 6. Потенциальная $\delta$-яма.

6.1. Частица находится в потенциале $U(x) = U_0(x) - \alpha\delta(x - x_0)$, где $U_0(x)$ — некоторая кусочно-непрерывная функция, $\delta(x)$ — дельта-функция Дирака, $\alpha > 0$ — эффективная глубина $\delta$-ямы. Показать, что решение $\psi(x;t)$ уравнения Шрёдингера на всей оси с потенциалом $U(x)$,

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + U(x)\psi(x;t),$$

может быть найдено как решение уравнения Шрёдингера на двух полуосях, $(-\infty, x_0)$ и $(x_0, \infty)$, с потенциалом $U_0(x)$, подчиняющееся граничным условиям

$$\psi(x_0 + 0;t) = \psi(x_0 - 0;t), \qquad \psi'_x(x_0 + 0;t) - \psi'_x(x_0 - 0;t) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(x_0;t).$$

**Замечание:** $\displaystyle\int\limits_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} \delta(x - x_0)f(x) = f(x_0)$.

6.2. Найти минимальное значение энергии $E_0$ $(E_0 < 0)$ и соответствующую стационарную волновую функцию $\psi(x;t) = \psi(x)\exp\big(iE_0t/\hbar\big)$ частицы в потенциале

$$U(x) = \begin{cases} -\alpha\delta(x - x_0), & x \geqslant 0, \\ \infty, & x < 0. \end{cases}$$

Определить критическое значение глубины ямы $\alpha_{\text{cr}}$, при котором $E_0 = 0$, то есть частица не может «находиться» в яме.

### Домашнее задание 6.

6.3. Найти минимальное значение энергии $E_0$ $(E_0 < 0)$ и соответствующую стационарную волновую функцию $\psi(x;t) = \psi(x)\exp\big(iE_0t/\hbar\big)$ частицы, находящейся в потенциале

(a) $U(x) = -\alpha\delta(x)$,

(b) $U(x) = -\alpha\delta(x) - \beta\delta(x - x_0)$,

(c) $U(x) = \begin{cases} -\alpha\delta(x - x_0), & x \geqslant 0, \\ U_0, & x < 0. \end{cases}$

Здесь $U_0 > 0$, $\beta \geqslant \alpha > 0$. Определить значения параметров, при которых частица может «находиться» в яме.

6.4. В условиях задачи 6.3a вычислить среднее значение координаты, импульса, квадрата импульса, кинетической и потенциальной энергий частицы в состоянии с энергией $E_0$.

**Замечание:** Оператор кинетической энергии $\hat{T} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m}$.

# 7. Прохождение частиц через потенциальный барьер.

7.1. Определить коэффициенты прохождения $T$ и отражения $R$ потока частиц, падающих на потенциальный барьер

$$U(x) = \begin{cases} U_0, & x \geqslant 0, \\ 0, & x < 0, \end{cases}$$

при энергии частиц $E > U_0 > 0$. Рассмотреть предельные случаи:

(a) $E \to \infty$; (b) $E \to U_0$.

7.2. Показать, что в задаче 7.1 коэффициенты прохождения $T$ и отражения $R$ не зависят от того, с какой стороны частицы падают на барьер.

## Домашнее задание 7.

7.3. Определить коэффициенты прохождения $T$ и отражения $R$ потока частиц, падающих на потенциальный барьер

$$U(x) = \begin{cases} U_1, & x > x_0, \\ U_0, & 0 \leqslant x \leqslant x_0, \\ 0, & x < 0, \end{cases}$$

при энергии частиц $E > 0$. Рассмотреть следующие случаи:

(a) $U_1 = 0$, $U_0 > E > 0$; (b) $U_1 = 0$, $E > U_0 > 0$;

(c) $U_1 = 0$, $E = U_0 > 0$; (d) $E > U_0 > U_1 > 0$;

(e) $U_0 > E > U_1 > 0$. (f) $E = U_0 > U_1 > 0$;

Упростить полученные выражения в предельных случаях: $E \to \infty$ ($E \gg U_0$) и $E \to U_1$.

**Замечание:** Пункты (a), (b) и (c) — частные случаи (d), (e) и (f) при $U_1 = 0$.

7.4. Определить коэффициенты прохождения $T$ и отражения $R$ потока частиц, двигающихся над потенциальной ямой

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, x > x_0, \\ -U_0, & 0 \leqslant x \leqslant x_0. \end{cases}$$

при энергии частиц $E > 0$ и $U_0 > 0$. Упростить полученные выражения в предельных случаях: $E \to \infty$ и $E \to 0$. Показать, что коэффициенты прохождения $T$ и отражения $R$ не зависят от того, с какой стороны частицы падают на барьер.

# 8. Потенциальный $\delta$-барьер.

8.1. Определить значения энергии, при которых частицы не отражаются от потенциального барьера

$$U(x) = \alpha\big(\delta(x) + \delta(x - x_0)\big), \quad \alpha > 0.$$

**Замечание:** Для нахождения волновой функции см. задачу 6.1.

8.2. Возможно ли полное прохождение через потенциальный барьер

$$U(x) = \alpha\big(\delta(x) - \delta(x - x_0)\big), \quad \alpha > 0,$$

для частиц с энергией $E > 0$?

## Домашнее задание 8.

8.3. Определить коэффициенты прохождения $T$ и отражения $R$ потока частиц, падающих на потенциальный барьер

(a) $U(x) = \alpha\delta(x)$;

(b) $U(x) = \alpha\big(\delta(x) + \delta(x - x_0)\big)$;

(c) $U(x) = \begin{cases} \alpha\delta(x), & x \leqslant 0, \\ -U_0, & x > 0; \end{cases}$

при энергии частиц $E > 0$; $U_0 > 0$ и $\alpha > 0$.

8.4. Используя результат задачи 8.3b, определить величину барьера $\alpha$, при которой коэффициент отражения $R$ частиц с энергией $E$ от потенциального барьера

$$U(x) = \alpha\big(\delta(x) - \delta(x - x_0)\big),$$

достигает максимального значения $R_{\max}$, и вычислить его.

**Замечание:** Положение точки экстремума $\alpha_0$ функции $R(\alpha)$ может быть найдено как решение уравнения $R'(\alpha_0) = 0$. Затем $R_{\max} = R(\alpha_0)$.

# 9. Теория возмущений

9.1. Показать, что уровни энергии $E_n$ и соответствующие волновые функции $\psi_n(x)$ квантовомеханической системы, описываемой оператором Гамильтона $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$, могут быть представлены в виде

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \ldots, \qquad \psi_n(x) = \psi_n^{(0)}(x) + \sum_k \left(c_{nk}^{(1)} + c_{nk}^{(2)} + \ldots\right)\psi_k^{(0)}(x),$$

где $E_n^{(0)}$ и $\psi_n^{(0)}(x)$ — уровни энергии и нормированные волновые функции системы с невозмущенным гамильтонианом: $\hat{H}_0\psi_n^{(0)}(x) = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}(x)$, а первые поправки к уровням энергии и волновым функциям можно вычислить следующим образом:

$$E_n^{(1)} = H'_{nn},$$
$$c_{nk}^{(1)} = \begin{cases} \dfrac{H'_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}, & k \neq n, \\ 0, & k = n. \end{cases} \qquad H'_{kn} = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \psi_k^{(0)*}(x)\hat{H}'\psi_n^{(0)}(x)\mathrm{d}x.$$

Старшими поправками $E_n^{(2)}, E_n^{(3)}, \ldots$ и $c_{nk}^{(2)}, c_{nk}^{(3)}, \ldots$ можно пренебречь, если

$$|H'_{kn}| \ll |E_n^{(0)} - E_k^{(0)}|.$$

**Замечание:** Поправки второго порядка малости могут быть вычислены следующим образом:

$$E_n^{(2)} = \sum_{m\neq n} \frac{|H'_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}, \qquad c_{nk}^{(2)} = \begin{cases} \displaystyle\sum_{m\neq n} \frac{H'_{km}H'_{mn}}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right)} - \frac{H'_{kn}H'_{nn}}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)^2}, & k \neq n, \\ \displaystyle -\frac{1}{2}\sum_{m\neq n} \frac{|H'_{mn}|^2}{\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right)^2}, & k = n. \end{cases}$$

9.2. Частица находится в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины $a$ ($0 \leqslant x \leqslant a$, см. задачу 5.1). Возмущенный потенциал имеет вид:

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

(a) В первом порядке теории возмущений найти энергетические уровни и соответствующие волновые функции в потенциале:

$$V(x) = \frac{U_0}{a}\big(a - |2x - a|\big).$$

(b) Рассчитать в первых двух порядках теории возмущений уровни энергии частицы в потенциале: $\quad V(x) = U_0 \cos^2 \dfrac{\pi x}{a}$.

Считать $U_0$ малым параметром. Указать условия применимости полученного результата.

## Домашнее задание 9.

9.3. В условиях задачи 9.1, получить аналитические выражения для

(a) второй $E_n^{(2)}$; (b) третьей $E_n^{(3)}$

поправок к уровню энергии $E_n$.

9.4. Частица находится в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины $a$ ($0 \leqslant x \leqslant a$, см. задачу 5.1). Возмущенный потенциал имеет вид:

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

(a) В первом порядке теории возмущений энергетические уровни и соответствующие волновые функции в потенциале: $V(x) = \dfrac{U_0}{a}|2x - a|$.

(b) Рассчитать в первых двух порядках теории возмущений уровни энергии частицы в потенциале: $V(x) = U_0 \sin^2 \dfrac{\pi x}{a}$.

(c) Рассчитать в первых трех порядках теории возмущений уровни энергии частицы в потенциале: $V(x) = \alpha\big(\delta(x - a/3) - \delta(x - 2a/3)\big)$.

Считать $U_0$ и $\alpha$ малыми параметрами. Указать условия применимости полученного результата.

# 10. Момент импульса

10.1. Построить оператор момента импульса $\hat{\vec{L}}$ используя его классическое представление $\vec{L} = [\vec{r} \times \vec{p}]$.

**Замечание:** Оператор импульса $\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla = \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}\right)$.

10.2. Показать, что в сферических координатах $x = r\cos\varphi\cos\theta$, $y = r\sin\varphi\cos\theta$, $z = r\sin\theta$, оператор проекции момента импульса на ось $z$ равен

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}.$$

10.3. Вычислить коммутаторы:

(a) $[\hat{L}_x, \hat{\vec{p}}]$; (b) $[\hat{L}_y, \hat{\vec{r}}^2]$.

10.4. Показать, что функции, получающиеся в результате действия операторов $\hat{l}_{\pm} = \hat{l}_x \pm \hat{l}_y$ на собственные функции $\psi_m$ оператора проекции момента на ось $z$: $\hat{l}_z\psi_m = m\psi_m$, также являются собственными функциями оператора $\hat{l}_z$, отвечающие собственным значениям $m \pm 1$.

**Замечание:** Здесь операторы безразмерного момента $\hat{l}_\alpha = \frac{i}{\hbar}L_\alpha$.

## Домашнее задание 10.

10.5. Показать, что оператор квадрата момента импульса $\hat{L}^2$ коммутирует с любой его проекцией (например, $\hat{L}_x$).

10.6. Вычислить коммутаторы:

(a) $[\hat{L}_z, \hat{\vec{p}}^2]$; (b) $[\hat{L}_y, \hat{\vec{r}}\hat{\vec{p}}]$; (c) $[\hat{L}_x, \hat{\vec{p}}(\hat{\vec{r}}\hat{\vec{p}})\,]$.

10.7. Используя результат задачи 10.2, вычислить собственные значения и собственные функции оператора $\hat{l}_z$.

10.8. В состоянии частицы, волновая функция которого имеет угловую зависимость $\psi(\varphi) = A\cos^n\varphi$, найти вероятность того, что что проекция момента на ось $z$ равна $m$ ($m$ и $n$ — целые числа).

**Замечание:** Для вычисления вероятностей необходимо разложить $\psi(\varphi) = A\cos^n\varphi$ по собственным функциям, которые были найдены в задаче 10.7. Тогда квадрат модуля коэффициента перед $\psi_m$ в этом разложении и будет представлять собой требуемую вероятность.

10.9. Показать, что в состоянии $\psi_m$ с определенной проекцией момента на ось $z$ (см. задачу 10.4):

(a) $\overline{l_x} = \overline{l_y} = 0$; (b) $\overline{l_x l_y} = -\overline{l_y l_x} = im/2$; (c) $\overline{l_x^2} = \overline{l_y^2}$.

## 11. Квазиклассическое приближение

11.1. Показать, что в предельном случае $\hbar \to 0$ решение стационарного уравнения Шредингера может быть найдено в виде

$$\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} \exp\Big[\frac{i}{\hbar}\int p(x)\mathrm{d}x\Big] + \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} \exp\Big[-\frac{i}{\hbar}\int p(x)\mathrm{d}x\Big],$$

где $p(x) = \sqrt{2m\big[E - U(x)\big]}$ — квазиклассический импульс.

**Замечание:** Представьте волновую функцию в виде $\psi(x) = \exp\big[iS(x)/\hbar\big]$. Затем разложите $S(x)$ в ряд по степеням $\hbar$:

$$S(x) = S_0(x) + (\hbar/i)S_1(x) + (\hbar/i)^2 S_2(x) + \ldots$$

11.2. Найти в квазиклассическом приближении волновую функцию частицы с энергией $E$ в потенциале:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, x > x_0, \\ U_0, & 0 \leqslant x \leqslant x_0. \end{cases}$$

Здесь $0 < E < U_0$. Сравнить с точным результатом.

11.3. Используя правило квантования Бора-Зоммерфельда вычислить уровни энергии гармонического осциллятора:

$$U(x) = \frac{\alpha x^2}{2}, \quad \alpha > 0.$$

Указать условия применимости результата.

**Замечание:** Правило квантования Бора-Зоммерфельда для уровней энергии $E_n$:

$$\int\limits_a^b \sqrt{2m\big[E_n - U(x)\big]}\mathrm{d}x = \pi\hbar(n + 1/2),$$

где $a$ и $b$ — точки поворота ($U(a) = U(b) = E_n$). Результат применим при $n \gg 1$.

11.4. Оценить в квазиклассическом приближении коэффициент прозрачности барьера

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ U_0(1 - x/a), & x \geqslant 0. \end{cases}$$

Здесь $0 < E < U_0$. Какова точность полученного результата?

**Замечание:** Коэффициент прозрачности $T(E)$ для частиц с энергией $E$ в квазиклассическом приближении может быть оценен следующим образом,

$$T(E) = \exp\big[-L(E)\big], \quad L(E) = \frac{2}{\hbar}\int\limits_a^b \sqrt{2m\big[E - U(x)\big]}\mathrm{d}x.$$

Эта оценка верна, если $L(E) \gg 1$.

## Домашнее задание 11.

11.5. Для частицы, находящейся в поле $U(x) = U_0\big|x/a\big|^\nu$, $U_0 > 0$, $\nu > 0$, найти в квазиклассическом приближении, как изменяется (в зависимости от параметра $\nu$) расстояние между соседними уровнями энергии $E_n$ с увеличением $n$.

**Замечание:** См. задачу 9.4 (ГКК). $\int\limits_0^1 \sqrt{1-t^\nu}\mathrm{d}t = \dfrac{\sqrt{\pi}}{2\nu}\dfrac{\Gamma\big[\nu^{-1}\big]}{\Gamma\big[3/2+\nu^{-1}\big]}$.

11.6. Исходя из правил квантования Бора-Зоммерфельда, получить выражение для смещения энергетических уровней частицы при изменении потенциальной энергии на малую величину $\delta U(x)$. Показать, что результат согласуется с аналогичным результатом, полученным в первом порядке теории возмущений.

**Замечание:** См. задачу 9.16 (ГКК). При использовании теории возмущений считать волновую функцию невозмущенного $n$-состояния:

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{C}{\sqrt{p_n(x)}}\sin\left[\frac{1}{\hbar}\int\limits_a^x p_n(x)\mathrm{d}x + \frac{\pi}{4}\right], & a < x < b, \\ 0, & x \leqslant a,\, x \geqslant b, \end{cases}$$

где $p_n(x) = \sqrt{2m\big[E_n - U(x)\big]}$, $a$ и $b$ — точки поворота ($U(a) = U(b) = E_n$), константу $C$ необходимо найти из условия нормировки.

11.7. Оценить в квазиклассическом приближении коэффициент прозрачности барьера

$$\text{(a) } U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ U_0\exp(-x/a), & x \geqslant 0; \end{cases}$$

$$\text{(b) } U(x) = \begin{cases} 0, & |x| > a, \\ U_0(1 - x^2/a^2), & |x| < a. \end{cases}$$

Здесь $0 < E < U_0$. Какова точность полученного результата?

# 12. Движение в центральном поле

Волновая функция частицы, двигающейся в центральном поле $U(r,\theta,\varphi) = U(r)$, с заданными квантовыми азимутальным $l$ и магнитным $m$ числами, может быть представлена в виде $\psi(r,\theta,\varphi) = \psi(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$, где $\psi(r)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\Big(r^2\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}r}\Big) + \frac{2\mu}{\hbar^2}\Big(E - U(r) - \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2}\Big)\psi(r) = 0.$$

Здесь $\mu$ — масса частицы[1], $E$ — ее энергия, $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ — сферические функции.

12.1. Пусть потенциальная энергия $U(r)$ удовлетворяет условиям:

$$\lim_{r\to 0} r^2 U(r) = 0, \quad \lim_{r\to\infty} U(r) = 0,$$

а энергия частицы $E < 0$. Показать, что для функции $\psi(r)$ верно:

(a) $\psi(r) \sim r^p$ при $r \to 0$; (b) $\psi(r) \sim \exp(-kr)$ при $r \to \infty$.

Определить $p$ и $k$.

**Замечание:** $p = l$, $k = \sqrt{2\mu|E|}/\hbar$.

12.2. Используя результат задачи 12.4, показать, что в кулоновском поле,

$$U(r) = -\frac{\alpha}{r}, \quad \alpha > 0,$$

функция $g(r)$ — полином степени $n_r = 0, 1, 2, \ldots$. Вычислить уровни энергии частицы с $E < 0$.

**Замечание:** $E_n = \dfrac{\mu\alpha^2}{2\hbar^2 n^2}$, $n = l+1, l+2, \ldots$. Здесь $n = n_r + l + 1$ называется главным квантовым числом, а $n_r$ — радиальным квантовым числом.

12.3. Для электрона с главным $n = 4$ и азимутальным $l = 1$ квантовыми числами в поле ядра атома гелия ($\alpha = 2e^2$, $e$ — заряд электрона) построить $\psi(r)$ и вычислить:

(a) радиус электронного облака $\overline{r}$;

(b) толщину электронного облака $\overline{r^2} - \overline{r}^2$.

**Замечание:** Средние значения вычисляем по формуле

$$\overline{r^m} = \int\limits_0^\infty r^{m+2}|\psi(r)|^2\mathrm{d}r \Big/ \int\limits_0^\infty r^2|\psi(r)|^2\mathrm{d}r.$$

Для вычисления этих интегралов удобно показать, что:

$$I_s = \int\limits_0^\infty r^s \exp(-\kappa r)\mathrm{d}r = \frac{s}{\kappa}I_{s-1} = \cdots = \frac{s!}{\kappa^s}I_0 = \frac{s!}{\kappa^{s+1}}.$$

[1] $m$ для массы частицы не используем, чтобы не было путаницы с магнитным квантовым числом $m$.

# Домашнее задание 12.

12.4. Показать, что в условиях задачи 12.1 функцию $\psi(r)$ можно представить в виде $\psi(r) = g(r) r^l \exp(-kr)$, где $k = \sqrt{2\mu|E|}/\hbar$, а функция $g(r)$ удовлетворяет уравнению:

$$rg''(r) + 2g'(r)(l - kr + 1) - g(r)\big[2k(l+1) + ru(r)\big] = 0,$$

где $u(r) = 2\mu U(r)/\hbar^2$.

**Замечание:** Уравнение для $g(r)$ получается непосредственной подстановкой $\psi(r) = g(r) r^l \exp(-kr)$ в уравнение для $\psi(r)$, вычислением производных и сокращением во всех слагаемых $r^{l-1}\exp(-kr)$.

12.5. Решить задачу 12.3 для

(a) $n = 3$, $l = 2$, $\alpha = 3e^2$; (b) $n = 2$, $l = 0$, $\alpha = 4e^2$.

12.6. Найти распределение по импульсам частицы в основном состоянии в кулоновском поле

$$U(r) = -\frac{\alpha}{r}, \quad \alpha > 0.$$

**Замечание:** Основное состояние: $n_r = l = m = 0$.
Распределение по импульсам равно $\mathrm{d}w(\vec{p}) = |\psi(\vec{p})|^2 \mathrm{d}\vec{p}$, где $\psi(\vec{p})$ — импульсное представление $\psi(r)$:

$$\psi(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \psi(r) \exp(-i\vec{p}\vec{r}/\hbar) \mathrm{d}\vec{r}.$$