Министерство образования и науки Украины

Харьковский национальный университет им. В. Н. Каразина

Физический факультет

Кафедра теоретической физики им. акад. И. М. Лифшица

Практические занятия

по курсу

Квантовая механика

Харьков — 2016

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

1.3. Вычислить явный вид оператора $\exp\left[a\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right]$, где a — произвольная действительная постоянная.

Домашнее задание 1.

1.4. Вычислить операторные выражения:

$$\text{(a)}\ \left(\frac{1}{x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^2;\ \textit{(1.5б)} \qquad \text{(b)}\ \left[x^2+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}, \frac{1}{x}\right];\ \textit{(1.5б)} \qquad \text{(c)}\ \left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}, \cos(2x)\right];\ \textit{(1.5б)}$$

1.5. Даны три оператора $\hat{K}$, $\hat{L}$ и $\hat{M}$. Доказать следующие соотношения:

(a) $[\hat{K}\hat{L}, \hat{M}] = \hat{K}[\hat{L}, \hat{M}] + [\hat{K}, \hat{M}]\hat{L}$; *(1б)*

(b) $\big[\hat{K}, [\hat{L}, \hat{M}]\big] + \big[\hat{L}, [\hat{M}, \hat{K}]\big] + \big[\hat{M}, [\hat{K}, \hat{L}]\big] = 0$ (соотношение Якоби); *(1б)*

(c) $e^{\hat{M}}\hat{L}e^{-\hat{M}} = \hat{L} + [\hat{M}, \hat{L}] + \frac{1}{2!}\big[\hat{M}, [\hat{M}, \hat{L}]\big] + \frac{1}{3!}\Big[\hat{M}, \big[\hat{M}, [\hat{M}, \hat{L}]\big]\Big] + \dots$; *(2б)*

Замечание: $e^{\hat{K}} = \hat{1} + \hat{K} + \frac{1}{2!}\hat{K}^2 + \frac{1}{3!}\hat{K}^3 + \dots$

1.6. Вычислить явный вид оператора $\exp\big[ia\hat{I}\big]$, где a — произвольная действительная постоянная, $\hat{I}$ — оператор отражения, $\hat{I}\psi(x) = \psi(-x)$. *(1.5б)*

2. Эрмитово сопряженные линейные операторы. Эрмитовы операторы.

2.1. 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 операторы $\hat{M} = (\hat{L} + \hat{L}^\dagger)/2$ и $\hat{N} = i(\hat{L}^\dagger - \hat{L})/2$ — эрмитовы.

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

$$\text{(a) } \hat{L}\varphi(x) = ix\varphi(x); \quad \text{(b) } \hat{L}\varphi(x) = \frac{\mathrm{d}\varphi(x)}{\mathrm{d}x}; \quad \text{(c) } \hat{L}\varphi(x) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y L(x,y)\varphi(y).$$

2.3. Ядро $L(x,y)$ оператора $\hat{L}$ (см. 2.2c) 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 $\hat{L}$?

Домашнее задание 2.

2.4. Для произвольных операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ доказать, что:

(a) $\left(\hat{A}^\dagger\right)^\dagger = \hat{A}$; *(1б)* (b) $\left(\hat{A}\hat{B}\right)^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$; *(1б)*

(c) $\hat{A}\hat{A}^\dagger$, $\hat{A}^\dagger\hat{A}$ и $[\hat{A}, \hat{A}^\dagger]$ — эрмитовы операторы; *(1б)*

(d) если $\hat{A}$ — эрмитов, то $\hat{B}\hat{A}\hat{B}^\dagger$ также эрмитов. *(1б)*

(e) если $\hat{A}$ и $\hat{B}$ — эрмитовы, то операторы $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ и $i\big(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\big)$ также эрмитовы. *(1б)*

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

(a) $\hat{L} = \hat{I}$ — оператор отражения, $\hat{I}\psi(x) = \psi(-x)$; *(1б)*

(b) $\hat{L} = \hat{T}_a$ — оператор сдвига, $\hat{T}_a\psi(x) = \psi(x+a)$; *(1б)*

(c) $\hat{L} = \dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$; *(1.5б)* (d) $\hat{L} = \left(x + \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^2$. *(1.5б)*

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

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

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

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

3.2. Вычислить средние значения

(a) $\bar{p}$ — импульса; (b) $\overline{x^2}$ — квадрата координаты;

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

Замечание 1: Оператор импульса определен выражением $\hat{p} = -i\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$.

Замечание 2: $\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\mathrm{d}x = \sqrt{\pi}$.

Домашнее задание 3.

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

(a) $\hat{L} = \begin{pmatrix} 1 & i \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$; *(1б)* (b) $\hat{L} = 1 + 2x + \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$; *(1б)* (c) $\hat{L} = x\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + x^2$. *(1.5б)*

Замечание: $\int\limits_{0}^{\infty} x^a e^{-x^2}\mathrm{d}x = \dfrac{1}{2}\Gamma\Big[\dfrac{1+a}{2}\Big]$, $\quad \mathrm{Re}\, a > -1$.

3.4. Эрмитов оператор $\hat{L}$ удовлетворяет соотношению $\hat{L}^2 = \lambda\hat{L}$, где λ — вещественное число. Каковы возможные собственные значения оператора $\hat{L}$? *(1б)*

3.5. Вычислить средние значения (a) $\overline{x}$; *(1б)* (b) $\overline{p^2}$; *(1б)* (c) $\overline{\left(x - \bar{x}\right)^2}$ *(1б)* для волнового состояния системы, описываемого собственными функциями оператора $\hat{L} = x + \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ из задачи 3.1b.

3.6. Показать, что средние значения операторов $\hat{M}\hat{M}^\dagger$ и $\hat{M}^\dagger\hat{M}$ ($\hat{M}$ — некоторый оператор) в произвольном волновом состоянии неотрицательны. *(1б)*

3.7. Вычислить средний импульс частицы, волновое состояние которой имеет вид $\psi(x) = C\exp(ip_0x/\hbar)\phi(x)$, где $\phi(x)$ — вещественная функция. *(1.5б)*

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) $\psi(x) = C \exp\left[\dfrac{i p_0 x}{\hbar} - \dfrac{(x - x_0)^2}{2a^2}\right].$

Замечание 1: Волновая функция в импульсном представлении $\psi(p) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-ipx/\hbar} \mathrm{d}x.$

Замечание 2: 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) $\hat{L}_x \varphi(x) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y L(x, y) \varphi(y).$

Замечание: Если в координатном представлении $\hat{L}_x \psi(x) = \phi(x)$, то в импульсном представлении $\hat{L}_p \psi(p) = \phi(p)$.

Домашнее задание 4.

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

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

(b) $\psi(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ C x \exp\big(i\alpha x - \beta x\big), & x \geqslant 0,\ \alpha > 0,\ \beta > 0. \end{cases}$ *(2б)*

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) $\hat{L}_x = x;$ *(2.5б)* (b) $\hat{L}_x = \dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2};$ *(2б)* (c) $\hat{L}_x \varphi(x) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y L(x, y) \varphi(y).$ *(1.5б)*

5. Момент импульса

5.1. Вычислить коммутаторы: (a) $[\hat{L}_x, \hat{L}_y]$; (b) $[\hat{L}_x, \hat{L}_y^2]$, где $\hat{\vec{L}} = [\hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}]$ — оператор момента импульса.

5.2. Показать, что функции, получающиеся в результате действия операторов $\hat{l}_\pm = \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y$ на собственные функции ψ_m оператора проекции момента импульса на ось z: $\hat{l}_z\psi_m = m\psi_m$, также являются собственными функциями оператора $\hat{l}_z$, отвечающие собственным значениям $m \pm 1$. Здесь операторы безразмерного момента импульса $\hat{\vec{l}} = \hbar^{-1}\hat{\vec{L}}$.

5.3. 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

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

Домашнее задание 5.

5.5. Показать, что оператор квадрата момента импульса $\hat{\vec{L}}^2$ коммутирует с любой его проекцией (например, $\hat{L}_x$). *(1б)*

5.6. Вычислить коммутаторы: (a) $[\hat{L}_y, \hat{\vec{r}}]$, *(1б)* (b) $[\hat{L}_x, \hat{\vec{p}}]$; *(1б)* (c) $[\hat{L}_y, \hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{p}}]$; *(1б)*

5.7. Показать, что в состоянии ψ_m с определенной проекцией момента на ось z (см. задачу 5.2):

(a) $\overline{l_x} = \overline{l_y} = 0$; *(1б)* (b) $\overline{l_x^2} = \overline{l_y^2}$; *(1б)* (c) $\overline{l_x l_y} = -\overline{l_y l_x} = im/2$. *(1б)*

5.8. Используя результат задачи 5.3, вычислить собственные значения и собственные функции оператора $\hat{L}_z$. *(1б)*

5.9. В состоянии частицы, волновая функция которого имеет угловую зависимость $\psi(\varphi) = A\cos^n\varphi$, найти вероятность того, что проекция момента импульса L_z равна $\hbar m$ (m и n — целые числа). *(2б)*

Замечание: Для вычисления вероятностей необходимо разложить $\psi(\varphi) = A\cos^n\varphi$ по собственным функциям, которые были найдены в задаче 5.8. Тогда квадрат модуля коэффициента перед ψ_m в этом разложении и будет представлять собой требуемую вероятность.

6. Одномерное движение. Бесконечно-глубокая потенциальная яма.

6.1. Движение одномерной частицы массы m описывается уравнением Шрёдингера

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

Рассмотрим потенциал

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

(a) Определить волновые функции $\psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$ стационарных состояний и спектр энергий частицы.

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

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

6.2. Определить среднее значение кинетической энергии в состоянии, описываемым $\psi(x,t=0)$ из задачи 6.1b.

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

Домашнее задание 6.

6.3. Частица массы m 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. *(4б)*

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

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

(4б)

6.4. Определить среднее значение кинетической энергии в *произвольный* момент времени t в состоянии, описываемым $\psi(x,t)$ из задачи 6.3b. *(2б)*

7. Потенциальная δ-яма.

7.1. Найти возможные значения энергии $E < 0$ и соответствующие нормированные стационарные волновые функции (связанные состояния) частицы массы m в потенциале

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

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

Замечание: Решение уравнение Шредингера может быт найдено на двух полуосях, $(-\infty, x_0)$ и (x_0, ∞), то есть там, где $\delta(x - x_0) = 0$, подчиняющееся граничным условиям

$$\psi(x_0 + 0) = \psi(x_0 - 0), \qquad \psi'_x(x_0 + 0) - \psi'_x(x_0 - 0) = -\tfrac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(x_0).$$

7.2. Решить задачу 7.1 в импульсном представлении.

Замечание 1: В рамках задачи 7.1: $\psi(p) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \displaystyle\int_0^\infty \psi(x) e^{-ipx/\hbar} \mathrm{d}x$.

Замечание 2: При вычислениях учитывать $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\alpha y}}{1 + y^2} \mathrm{d}y = \pi e^{-|\alpha|}$.

Домашнее задание 7.

7.3. Найти возможные значения энергии $E < 0$ и соответствующие стационарные волновые функции (связанные состояния) частицы массы m, находящейся в потенциале

(a) $U(x) = -\alpha\delta(x)$, *(2б)* (b) $U(x) = -\alpha\delta(x) + \begin{cases} 0, & x \geqslant 0, \\ U_0, & x < 0. \end{cases}$ *(3б)*

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

7.4. В стационарном состоянии частицы, соответствующему наинизшему уровню энергии E_0, в задаче 7.3a вычислить средние значения
(a) координаты, *(0.5б)* (b) импульса, *(0.5б)* (c) квадрата импульса, *(0.5б)*
(d) кинетической энергий, *(0.5б)* (e) потенциальной энергий. *(0.5б)*

7.5. Решить задачу 7.3a в импульсном представлении. *(2.5б)*

8. Прохождение частиц через потенциальный барьер.

8.1. 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 $E > U_0 > 0$. Упростить полученные выражения в предельных случаях: $E \to \infty$ и $E \to U_0$.

Замечание: Поток вероятности определяется через волновую функцию $j(x) = \dfrac{\hbar}{m}\mathrm{Im}[\psi^*(x)\psi'(x)]$.

8.2. Показать, что в задаче 8.1 коэффициенты прохождения T и отражения R не зависят от того, с какой стороны частицы падают на барьер.

Домашнее задание 8.

8.3. Определить коэффициент прохождения T потока частиц, падающих на потенциальный барьер

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

где $U_0 > 0$. Рассмотреть следующие случаи:

(a) $U_0 > 0 > E$; *(1.5б)* (b) $U_0 > E = 0$; *(1б)*

(c) $U_0 > E > 0$; *(1.5б)* (d) $E = U_0$; *(1б)* (e) $E > U_0$; *(1.5б)*

Упростить полученные выражения в предельных случаях:

(f) $U_0 \gg E > 0$; *(0.5б)* (g) $E \gg U_0$. *(0.5б)*

(h) $U_0 \gg \Delta E_+ = E - U_0 > 0$; *(0.5б)* (i) $U_0 \gg \Delta E_- = U_0 - E > 0$. *(0.5б)*

8.4. Решить задачу 8.3 в случае $E > 0 > U_0$. Упростить полученный результат в предельном случае $|U_0| \gg E > 0$. *(1.5б)*

9. Потенциальный δ-барьер.

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

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

Домашнее задание 9.

9.3. Определить коэффициент прохождения T потока частиц, падающих на потенциальный барьер

(a) $U(x) = \alpha\delta(x)$; *(3б)* (b) $U(x) = \alpha\delta(x) + \begin{cases} 0, & x \leqslant 0, \\ -U_0, & x > 0; \end{cases}$ *(4б)*

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

9.4. 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 $E > 0$? *(3б)*

10. Движение в центральном поле

Волновая функция частицы с энергией $E < 0$ и массой μ, двигающейся в центральном поле $U(r)$, с заданными квантовыми азимутальным l и магнитным m числами, может быть представлена в виде $\psi(r,\theta,\varphi) = \psi(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$ с радиальной частью $\psi(r) = g(r)r^l \exp(-kr)$, где функция $g(r)$ удовлетворяет уравнению:

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

Здесь $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ — сферические функции, $u(r) = 2\mu U(r)/\hbar^2$, $k = \sqrt{2\mu|E|}/\hbar$.

10.1. Показать, что в кулоновском поле, $u(r) = -\alpha/r$, $\alpha > 0$, функция $g(r)$ — полином степени $n_r = 0, 1, 2, \dots$. Вычислить уровни энергии частицы.

Замечание: n_r и $n = n_r + l + 1$ называются радиальным и главным квантовыми числами.

10.2. Для электрона с главным $n = 4$ и азимутальным $l = 1$ квантовыми числами в поле ядра He ($\alpha = 4\mu e^2/\hbar^2$, e — заряд электрона) вычислить $\psi(r)$ и:

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

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

Замечание: Средние значения вычисляем как $\overline{r^m} = \int\limits_0^\infty \psi^*(r) r^m \psi(r) r^2 \mathrm{d}r$. Для вычисления этих интегралов удобно показать, что: $I_s = \int\limits_0^\infty r^s \exp(-\kappa r)\mathrm{d}r = \dfrac{s}{\kappa} I_{s-1} = \dots = \dfrac{s!}{\kappa^s} I_0 = \dfrac{s!}{\kappa^{s+1}}$.

Домашнее задание 10.

10.4. Решить задачу 10.2 для

(a) $n = 3$, $l = 2$, $\alpha = 6\mu e^2/\hbar^2$; *(3б)* (b) $n = 2$, $l = 0$, $\alpha = 8\mu e^2/\hbar^2$. *(3б)*

10.5. Найти распределение по импульсам частицы в основном состоянии в кулоновском поле $u(r) = -\alpha/r$, $\alpha > 0$. *(4б)*

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 $\psi(\vec{r})$:

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

11. Теория возмущений

11.1. 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

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

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:

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

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 определяются следующим образом:

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

11.2. Частица находится в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины a, см. задачу 6.1. Возмущенный потенциал имеет вид:

$$U(x) = \begin{cases} U_0 \cos^2 \dfrac{\pi x}{a}, & 0 \leqslant x \leqslant a, \\ \infty, & x < 0, x > a; \end{cases}$$

Рассчитать в первых двух порядках теории возмущений уровни энергии частицы. Считать U_0 малым параметром. Указать условия применимости полученного результата.

Домашнее задание 11.

11.3. В условиях задачи 11.1, получить аналитические выражения для поправок к уровню энергии E_n: (a) второй $E_n^{(2)}$; *(2б)* (b) третьей $E_n^{(3)}$. *(3б)*

11.4. Частица находится в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины $3x_0$. Возмущенный потенциал имеет вид:

$$U(x) = \begin{cases} V(x), & 0 \leqslant x \leqslant 3x_0, \\ \infty, & x < 0, x > 3x_0; \end{cases}$$

(a) В первом порядке теории возмущений энергетические уровни и соответствующие волновые функции в потенциале: $V(x) = U_0|1 - x/x_0|$. *(2б)*

(b) Рассчитать в первых трех порядках теории возмущений уровни энергии частицы в потенциале: $V(x) = \alpha\big[\delta(x - x_0) - \delta(x - 2x_0)\big]$. *(3б)*

Считать U_0 и α малыми параметрами. Указать условия применимости полученного результата.

12. Квазиклассическое приближение

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

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

12.2. Используя правило квантования Бора-Зоммерфельда вычислить уровни энергии гармонического осциллятора $U(x) = m\omega^2 x^2/2$.

Замечание: Правило квантования Бора-Зоммерфельда $\int\limits_a^b p(x)\mathrm{d}x = \pi\hbar\big(n+1/2\big)$, для уровней энергии E_n, где $p(x) = \sqrt{2m\big[E_n - U(x)\big]}$ — квазиклассический импульс, a и b — точки поворота, $U(a) = U(b) = E_n$.

12.3. Для частиц с энергией $0 < E < U_0$ оценить в квазиклассическом приближении коэффициент прозрачности барьера

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

Замечание: Коэффициент прозрачности $T(E)$ для частиц с энергией E в квазиклассическом приближении может быть оценен следующим образом, $T(E) \approx \exp\big[-\frac{2}{\hbar}\int\limits_a^b |p(x)|\mathrm{d}x\big]$. Здесь a и b — точки поворота.

Домашнее задание 12.

12.5. Для частицы, находящейся в потенциале $U(x) = U_0\big|x/a\big| > 0$, определить уровни энергии связанных состояний. *(3б)*

12.6. При энергии частицы $0 < E < U_0$ оценить в квазиклассическом приближении коэффициент прозрачности барьера

(a) $$U(x) = \begin{cases} 0, & |x| > a, \\ U_0(1 - x^2/a^2), & |x| < a; \end{cases}$$ *(3б)*

(b) $$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ U_0 \exp(-x/a), & x \geqslant 0. \end{cases}$$ *(4б)*

13. Спин. Матрицы Паули

Будем рассматривать частицу, обладающую спином 1/2, например, электрон. Тогда оператор спина этой частицы имеет вид $\hat{\vec{s}} = \hat{\vec{\sigma}}/2$, где $\hat{\vec{\sigma}} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$ — матрицы Паули,

$$\hat{\sigma}_0 = \hat{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

13.1. Вычислить собственные функции и собственные числа операторов $\hat{s}_x$, $\hat{s}_y$ и $\hat{s}_z$ проекций спина.

13.2. Определить вид оператора проекции спина $\hat{s}_n$ на направление, задаваемое произвольным единичным вектором $\vec{n} = (\cos\varphi \sin\theta, \sin\varphi \sin\theta, \cos\theta)$. Для состояния с определенным значением проекции спина $s_z = 1/2$ определить среднее значение $\bar{s}_n$.

13.3. Показать, что произвольную матрицу 2×2 можно разложить в линейную комбинацию матриц Паули

$$\hat{A} = a_0\hat{\sigma}_0 + a_x\hat{\sigma}_x + a_y\hat{\sigma}_y + a_z\hat{\sigma}_z, \text{ где } a_\gamma = \mathrm{Tr}(\hat{\sigma}_\gamma \hat{A})/2, \ \gamma = 0, x, y, z.$$

Здесь $\mathrm{Tr}\hat{B} = \mathrm{Tr}\begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix} = B_{11} + B_{22}$ — след матрицы $\hat{B}$.

Домашнее задание 13.

13.1. Пусть $\vec{n} = (\cos\varphi \sin\theta, \sin\varphi \sin\theta, \cos\theta)$ — произвольный единичный вектор.

(a) Определить собственные числа и собственные функции оператора проекции спина $\hat{s}_n$ на направление $\vec{n}$. *(2б)*

(b) Для состояния с определенным значением проекции спина $s_n = 1/2$ определить вероятность измерения $s_z = \pm 1/2$ на ось z. *(2б)*

(c) Вычислить оператор $\hat{R}_{\vec{n}} = \exp(i\vec{n}\hat{\vec{\sigma}}/2)$. *(4б)*

13.2. Вычислить коммутатор $[\hat{s}_x^k, \hat{s}_y^m]$, где k и m — натуральные числа. *(2б)*