Задачі до курсу квантової механіки

Андрій Жугаєвич (zhugayevych@univ.kiev.ua)

3 січня 2008 р.

§1. Математичний апарат квантової механіки

1. (3) Знайти оператори, спряжені до операторів x, $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$, $x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$, $\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}$, $\exp\left(a\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)$.
2. (5) Знайти комутатори: а) $[r_i, p_j]$, $[p_i, p_j]$; б) $[L_i, L_j]$, $[r_i, L_j]$, $[p_i, L_j]$, $[L^2, \boldsymbol{L}]$, $[p^2, \boldsymbol{L}]$; в) $[U(\boldsymbol{r}), \boldsymbol{p}]$, $[U(r), \boldsymbol{L}]$.
3. (5) Знайти власні значення і власні функції операторів імпульсу і кінетичної енергії.
4. (10) Показати, що оператор трансляції має вигляд $\exp\left(a\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)$. Довести його унітарність. Знайти власні значення і власні функції. Узагальнити на багатовимірний випадок.

§3. Задачі загального характеру

1. (10) Довести, що для гамільтоніану $H = \frac{p^2}{2m} + U(\boldsymbol{x})$ виконується співвідношення $\langle n|\boldsymbol{p}|n'\rangle = im\omega_{nn'}\langle n|\boldsymbol{x}|n'\rangle$.
2. (10) Показати, що сила з якою частинка діє на вертикальну стінку, розташовану в деякій точці, дорівнює $|\psi|^2\delta U$, де δU – стрибок потенціалу в цій точці. Показати також, що у випадку нескінченно високої стінки цей вираз зведеться до $\frac{\hbar^2}{2m}\psi'^2$.
3. (3) Показати, що потік імовірності для частинки в стані з хвильовою функцією $A\psi_1 + B\overline{\psi_1}$ є сумою двох протилежних потоків.
4. (3) Показати, що в одновимірному випадку потік імовірності для частинки в стаціонарному стані не залежить від координати.
5. (5) Оцінити характерні енергії електрона в атомі за розміром останнього.
6. (20) Для двох заданих станів ψ_i і ψ_f знайти незалежний від часу гамільтоніан, який переводить один стан у другий за найшвидший час, за умови, що різниця між найбільшим і найменшим власними значеннями гамільтоніану дорівнює $\hbar\omega$.

§4. Рух вільної частинки

1. (5) Для частинки у стані з хвильовою функцією $A\exp\left(-x^2/a^2 + \mathrm{i}kx\right)$ знайти: а) середні і дисперсії координати та імпульсу; б) густину і потік імовірності; в) розподіл імпульсу.
2. (5) Для частинки у стані з хвильовою функцією $A\exp\left(-\frac{x^2}{a^2+\mathrm{i}ab} + \mathrm{i}kx\right)$ перевірити співвідношення невизначеностей для координати і імпульсу.
3. (15) Для частинки у стані з хвильовою функцією $A\mathrm{e}^{-x^2/a^2}\cos kx$ знайти середні і дисперсії координати та імпульсу.
4. (20) Знайти пропагатор для вільної частинки.
5. (20) Дослідити еволюцію вільної частинки з хвильовою функцією $A\exp\left(-x^2/a^2 + \mathrm{i}kx\right)$ в початковий момент часу.
6. (5) Знайти імовірність того, що вільна частинка з початковою хвильовою функцією $A\exp\left(-x^2/a^2 + \mathrm{i}kx\right)$ полетить вправо.
7. (5) Навести приклад хвильової функції вільної частинки, що повністю зміщується вправо (тобто частинка з імовірністю 1 полетить вправо).
8. (20) Дослідити еволюцію вільної частинки з хвильовою функцією $A\exp\left(-\frac{x^2}{a^2+\mathrm{i}ab} + \mathrm{i}kx\right)$ в початковий момент часу.
9. (60) Знайти пропагатор для частинки в сталому однорідному полі $U(\boldsymbol{x}) = -\boldsymbol{F}\boldsymbol{x}$.
10. (20) Частинка рухається в сталому однорідному полі $U(\boldsymbol{x}) = -\boldsymbol{F}\boldsymbol{x}$. Показати, що якщо $\psi_0(t, \boldsymbol{x})$ розв'язок задачі з нульовою силою, то
$$\psi_0\left(t, \boldsymbol{x} - \frac{\hbar\boldsymbol{k}t}{m} - \frac{\boldsymbol{F}t^2}{2m}\right)\exp\left[\mathrm{i}\left(\boldsymbol{k} + \frac{\boldsymbol{F}t}{\hbar}\right)\left(\boldsymbol{x} - \frac{\hbar\boldsymbol{k}t}{2m}\right) - \mathrm{i}\frac{F^2t^3}{6m\hbar}\right]$$
– розв'язок задачі з ненульовою силою і видозміненою початковою умовою $\psi_0(0, \boldsymbol{x})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}}$.

11. (30) Дослідити рух частинки в сталому однорідному полі з хвильовою функцією $A \exp\left(-r^2/a^2 + \mathrm{i}\boldsymbol{kx}\right)$ в початковий момент часу.
12. (10) Узагальнюючи приклад гаусового пакету, з'ясувати умову, за якої визначена траєкторія квантової частинки. Розглянути приклад молекул повітря: з якою просторовою точністю можна говорити про траєкторію їх руху?
13. (2) Оцінити довжину хвилі де Бройля електрона, який має а) швидкість 1 км/с; б) енергію 1 еВ.

§5. Одновимірне рівняння Шредингера: спектр

1. (5-15) Для частинки в потенціальному ящику знайти $\psi(t, x)$, якщо: а) $\psi(0, x) = A\left(\sin \frac{\pi x}{a} + \sin \frac{2\pi x}{a}\right)$; б) $\psi(0, x) = A(a - |a - 2x|)$; в) $\psi(0, x) = Ax(a - x)$; г) $\psi(0, x) = A\sqrt{\frac{2}{a}} \sin^{2m+1} \frac{\pi x}{a}$.
2. (5) Обчислити матричні елементи оператора координати для потенціального ящика.
3. (3) Знайти дисперсію координати частинки в потенціальному ящику.
4. (5) Знайти розподіл імпульсу частинки в потенціальному ящику.
5. (8) Ефекти розмірного квантування: а) Оцінити розміри системи (наприклад, потенціальна яма), при яких спектр електрона можна вважати неперервним. б) Оцінити поперечні розміри планарної структури SiO_2–Si–SiO_2, при яких рух електрона можна вважати двовимірним. в) Оцінити поперечні розміри планарної структури SiO_2–Si–SiO_2, при яких висоту бар'єру Si–SiO_2 можна вважати нескінченною.
6. (10) Для електрона в потенціальній ямі ширини 1 нм і глибини 1 еВ обчислити дискретні рівні енергії.
7. (30) Вивести рівняння для рівнів енергії частинки в кусково-сталому потенціалі (з урахуванням дельта-кусків).
8. (50) Потенціал дорівнює $-V_1$ на відрізку $(-a_1 - b, -b)$, $-V_2$ на відрізку $(b, b + a_2)$, нулеві на відрізку $(-b, b)$ і нескінченний у всіх інших точках, причому $V_1 > V_2 > 0$ (дві відокремлені одна від одної ями). У початковий момент часу частинка знаходиться на дні лівої ями. Описати еволюцію цієї системи.
9. (5) Дослідити зв'язані стани частинки в дельта-ямі $U(x) = -\alpha\delta(x)$.
10. (10) Прямим інтегруванням перевірити ортонормованість власних функцій неперервного спектру для частинки в потенціалі $U(x) = \alpha\delta(x)$.
11. (15) Знайти функцію Гріна частинки в потенціалі $U(x) = \sum_i \alpha_i \delta(x - a_i)$.
12. (30) Знайти пропагатор для частинки в дельта-потенціалі.
13. (50) Описати еволюцію частинки в потенціалі $U(x) = -\alpha\delta(x) - \beta\delta(x - a)$, якщо в початковий момент часу частинка знаходиться в лівій ямі.
14. (10) Показати, що в багатовимірному випадку задача з дельта-потенціалом незмістовна.
15. (15) Для гармонічного осцилятора обчислити матричні елементи оператора координати і його степенів до четвертої включно.
16. (5) Знайти кінетичну енергію гармонічного осцилятора в стаціонарному стані.
17. (8) Для гармонічного осцилятора знайти розподіл імпульсу.
18. (2) Для основного стану гармонічного осцилятора обчислити значення хвильової функції в точці повороту класичної траєкторії по відношенню до її максимального значення.
19. (5) Порівняти квантовий і класичний розподіли координати гармонічного осцилятора.
20. (5) Знайти спектр і власні функції гармонічного осцилятора в однорідному полі.
21. (60) Знайти пропагатор гармонічного осцилятора.
22. (30) Дослідити еволюцію осцилятора з початковою хвильовою функцією $A \exp\left(-\alpha\xi^2 + i\kappa\xi\right)$, де $\xi = x\sqrt{m\omega/\hbar}$.

Знайти і проаналізувати рівні енергії і власні функції дискретного спектру для частинки в заданому потенціалі:
23. (20) Півосцилятор $U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \frac{\alpha}{x^2}$.
24. (20) Трикутна яма $U(x) = \alpha|x|$.
25. (20) Півтрикутна яма $U(x) = \alpha|x|$, $x > 0$.
26. (20) $U(x) = -\frac{V}{\cosh^2 \alpha x}$.
27. (20) $U(x) = V(e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x})$.
28. (20) $U(x) = -\alpha/|x|$.

§6. Одновимірне рівняння Шредингера: проходження бар'єру

1. (5) Знайти глибину проникнення частинки в потенціальну стінку висоти W. Зробити оцінку для інтерфейсу Si–SiO$_2$.
2. (30) Розглянути загальну схему знаходження коефіцієнта проходження частинки через кусково інтегровний потенціал.
3. (10) Показати, що для симетричного потенціалу амплітуда відбитої хвилі відновлюється за амплітудою хвилі, що пройшла.

Знайти коефіцієнт проходження для заданого потенціалу:

4. (10) Прямокутна потенціальна яма.
5. (5) $U(x) = \alpha\delta(x)$.
6. (5) $U(x) = \theta(x)W$.
7. (15) Потенціал дорівнює V при $0 < x < a$, $W < V$ при $x > a$ і нулю в інших випадках.
8. (45) Модель холодної емісії електронів. Потенціал дорівнює $W - Fx$ при $0 < x < a$, $W - Fa$ при $x > a$ і нулю в інших випадках.
9. (15) Знайти імовірність проходження гаусового пакету через дельта-потенціал. Побудувати графік залежності цієї імовірності від ширини пакету при фіксованій енергії пакету.

§7. Тривимірне рівняння Шредингера: спектр

1. (10-20) Знайти спектр і власні функції сферичного ротатора. Розглянути також багатовимірний випадок.
2. (5-15) Знайти гібридизовані атомні орбіталі, які відповідають таким координаціям центрального атома: а) лінійна; б) трикутна; в) тетраедрична; г) октаедрична.
3. (5) Знайти спектр і власні функції сферичного потенціального ящика.
4. (10-20) Знайти спектр і власні функції сферичної потенціальної ями. Розглянути також багатовимірний випадок.
5. (30) Оцінити зверху і знизу рівні енергії та знайти їх кількість для гіперсферичної потенціальної ями.
6. (10) При якій глибині сферичної потенціальної ями вона матиме хоча б один зв'язаний стан і як результат залежить від розмірності ями?
7. (20) Для електрона у сферичній потенціальній ямі радіусу 1 нм і глибини 1 еВ обчислити дискретні рівні енергії.
8. (10) Знайти спектр і власні функції циліндричної потенціальної ями (циліндр нескінченної довжини).
9. (10) Знайти спектр і власні функції потенціального ящика у формі циліндра (скінченної довжини).
10. (15) Дослідити залежність енергії основного рівня від форми потенціального ящика при фіксованому об'ємі на прикладі кубу, кулі і циліндра. Зробити висновки.
11. (20-60) Знайти спектр і власні функції для частинки в потенціалі $U(r) = -\alpha r^{-1} + \beta r^{-2}$. Розглянути також багатовимірний випадок.
12. (20) Знайти спектр і власні функції сферично-симетричного напівосцилятора: $U(r) = \frac{m\omega^2 r^2}{2} + \frac{\alpha}{r^2}$.
13. (5) Знайти середнє, дисперсію і найбільш імовірне значення відстані електрона до ядра в основному стані атома водню.
14. (10) Знайти середній радіус орбіти і його дисперсію для стаціонарних станів частинки в кулонівському потенціалі з заданими значеннями головного і орбітального квантових чисел.
15. (10) Знайти густину струму електрона в стаціонарному стані атома водню.
16. (10) Знайти долю потенціальної і кінетичної енергії радіального і обертального рухів для частинки в кулонівському потенціалі з заданими значеннями головного і орбітального квантових чисел.
17. (5) Знайти дипольний момент атома водню у стані $\psi = A(|200\rangle + |210\rangle)$.
18. (15) Знайти квадрупольний момент електрона в кулонівському потенціалі у стані $|nlm\rangle$.
19. (15) Знайти матричні елементи $\langle n,l|r|n,l-1\rangle$ в кулонівському потенціалі.
20. (15) Знайти матричні елементи $\langle n,l|r^2|n,l-2\rangle$ в кулонівському потенціалі.
21. (–) Вивести рекурентні співвідношення для матричних елементів $\langle nl|r^s|nl'\rangle$ в кулонівському потенціалі.
22. (15) Розглянути найпростішу модель воднеподібної домішки у квантовій точці: знайти спектр і залежність енергії іонізації домішки від розміру квантової точки.

23. (10) Знайти спектр і власні функції частинки в рівнобедреному прямокутному трикутнику.

§8. Частинка в центральному полі: задача розсіяння

Знайти власні функції неперервного спектру:
1. (10) Вільна частинка у сферичних координатах.
2. (25) Кулонівський потенціал.

Знайти переріз розсіяння і побудувати графік $\sigma(E)$ для таких потенціалів:
3. (20) Абсолютно непроникна куля радіусу a.
4. (30) Сферична потенціальна яма радіусу a і глибини V.
5. (40) Кулонівський потенціал.

§9. Частинка в періодичному потенціалі

Знайти зонний спектр і власні функції. Вказати характер розташування зон і оцінити їх межі. Знайти ефективні маси:
1. (20-40) Прямокутний періодичний потенціал, який на періоді $0 < x < a + b$ приймає значення 0 при $x < a$ і V при $x > a$.
2. (60) Потенціал в рівнянні Ламе.
3. (60) Потенціал в рівнянні Мат'є.

§12. Квазікласичне наближення

1. (15) Потенціал має в заданій точці розрив першого роду. Вказати умови квазікласичності в околі цієї точки і при виконанні цих умов зшити квазікласичні функції по обидва боки точки розриву.
2. (15) Нехай потенціал на нескінченності квазімонотонно прямує: а) до плюс нескінченності, б) до нуля (тут квазімонотонність означає, що функція затиснена між двома монотонними функціями з однаковими границями). Використовуючи квазікласичне наближення знайти головну асимптотику хвильової функції, вказати умови квазікласичного наближення, зробити висновки з точки зору локалізації хвильової функції.
3. (20) Нехай потенціал має вигляд $U(x) + \alpha\delta(x)$, де U – симетричний одноямний потенціал. Записати рівняння на спектр в квазікласичному наближенні.

Знайти дискретний спектр одновимірної системи із заданим потенціалом в квазікласичному наближенні, порівняти з точним значенням спектру і зробити висновки:
4. (10) Гармонічний осцилятор. Знайти також хвильові функції.
5. (5) Частинка в однорідному полі на півпрямій.
6. (10) $U = -\frac{V}{\cosh^2 \alpha x}$.
7. (10) $U = V(e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x})$.
8. (15) $U = \frac{a^2}{\sin^2 \alpha x} + \frac{b^2}{\cos^2 \alpha x}$.
9. (10) $U = -V \sin^2 \frac{\pi x}{a}$, $0 < x < a$, розглянути лише випадок невеликих V.
10. (20) Потенціал Ленарда–Джонса. Знайти також кількість зв'язаних станів.

Знайти дискретний спектр частинки у заданому сферично-симетричному потенціалі в квазікласичному наближенні, вказати умови квазікласичного наближення, порівняти з точним значенням спектру і зробити висновки:
11. (10) Сферично-симетричний осцилятор.
12. (10) Сферично-симетричний напівосцилятор: $U = \frac{m\omega^2 r^2}{2} + \frac{\alpha}{r^2}$.
13. (10) Кулонівський потенціал.

Знайти коефіцієнт прозорості бар'єру в квазікласичному наближенні для таких систем:

14. (5) Холодна емісія електронів з металу.
15. (10) α-розпад важких ядер.
16. (15) Частинка в двоямному потенціалі $U = \frac{m\omega^2}{8a^2}(x^2 - a^2)^2$. Знайти в квазікласичному наближенні частоту переходів між основними станами в ямах. За яких умов на параметри системи задача змістовна і допустиме квазікласичне наближення?
17. (10) Знайти кількість зв'язаних станів у d-вимірному сферично симетричному спадаючому до нуля на нескінченності потенціалі.
18. (25) Знайти першу поправку до квазікласичної формули для кількості станів частинки в потенціальному ящику довільної форми і розмірності.

§13. Варіаційний метод

Варіаційним методом знайти енергію і хвильову функцію перших двох рівнів наступних систем:
1. (15) Ангармонічний осцилятор.
2. (15) Частинка в потенціалі $U(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2 + \alpha x^6$.
3. (30) Частинка в потенціалі $U(x) = \alpha |x|^n$.
4. (15) Частинка в трикутній ямі.
5. (15) Частинка в потенціалі $U(x) = -V \sin^2 \frac{\pi x}{a}$, $0 < x < a$, розглянути випадок великих V.
6. (30) Частинка в потенціалі $V\left(\frac{a^2}{r^2} - 2\frac{a}{r}\right)$.
7. (20) Атом гелію без врахування спіну.
8. (15) Варіаційним методом знайти умову локалізації в потенціалі Юкави $U = -\alpha r^{-1} e^{-\lambda r}$.

§14. Стаціонарна теорія збурень

1. (15) Знайти перші дві поправки до рівнів енергії ангармонічного осцилятора, $V = \alpha x^3 + \beta x^4$.
2. (15) Розглянути наступну гіпотетичну модель атома літію: зовнішній (третій) електрон рухається в електричному полі ядра і двох спарених внутрішніх електронів. Хвильову функцію останніх взяти у вигляді хвильової функції основного рівня воднеподібного атома. Для зовнішнього електрона за незбурений потенціал прийняти повністю екранований внутрішніми електронами потенціал ядра, тобто e^2/r, а неповне екранування врахувати методом теорії збурень. Оцінити енергію основного стану зовнішнього електрона в першому порядку теорії збурень.
3. (25) Для двовимірного ізотропного осцилятора з частотою ω і з потенціалом збурення $V = \alpha x^2 y^2$ знайти поправки до енергії 0-, 1-, 2, 3-го рівнів в першому порядку теорії збурень та правильні хвильові функції нульового порядку, для основного рівня знайти також хвильову функцію в першому порядку і енергію в другому порядку теорії збурень.

§15. Нестаціонарна теорія збурень

1. (15) Для частинки в потенціальному ящику 1) знайти імовірності переходів в однорідному полі, прикладеному протягом проміжку часу T; 2) знайти імовірності переходів в однорідному полі, яке лінійно зростає на проміжку часу T до фіксованого значення; 3) знайти коефіцієнт поляризації.
2. (15) Знайти поляризовність атома водню в основному стані.

§20. Метод лінійної комбінації базисних функцій

1. (10) Знайти енергію основного стану ангармонічного осцилятора, потенціальна енергія якого в безрозмірних змінних має вигляд $\xi^2/2 + \xi^4$, з точністю до четвертого знаку. Який розмір базису треба при цьому взяти?
2. (20-40) Побудувати повний ортогональний тригонометричний базис для прямокутного трикутника. Для випадку співвідношення катетів 2 : 1 знайти енергію перших трьох рівнів з точністю до четвертого знаку. Який розмір базису треба при цьому взяти?

3. (20-40) Побудувати повний поліноміальний базис для рівнобедреного трикутника. Для рівностороннього трикутника знайти енергію перших трьох рівнів з точністю до четвертого знаку. Який розмір базису треба при цьому взяти?

§22. Взаємодія квантових систем з електромагнітним полем

1. (10) Вивести рівняння для еволюції середнього значення спіну в сталому магнітному полі.
2. (3) Яким способом найшвидше перевернути спін, приклавши магнітне поле?
3. (10) Дослідити рух електрона у сталому однорідному магнітному полі.
4. (20) Знайти час життя збуджених станів атома водню.

§24. Двоатомна молекула

1. (10) Для потенціалу Ленарда–Джонса знайти постійні коливально-обертального спектру. Чи можна таким потенціалом апроксимувати реальні потенціали молекул X_2?
2. (50) З'ясувати адекватність потенціалу

$$\frac{V}{m+k-\alpha}\left[(\alpha-k)\left(\frac{a}{r}\right)^m - m\left(\frac{r}{a}\right)^k \exp\left(-\alpha\left(\frac{r}{a}-1\right)\right)\right],$$

для апроксимації реальних потенціалів ковалентних молекул X_2?