Уральский государственный технический университет УГТУ – УПИ
имени первого президента России Б.Н. Ельцина

Квантовая механика
Методические указания к решению задач

Екатеринбург 2009

Пособие подготовлено в Уральском государственном техническом университете на кафедре теоретической физики и прикладной математики. Предназначается для студентов специальностей 140306, 140307, 200102, 200402, 210101, проходящих односеместровый курс нерелятивистской квантовой механики.

Составитель: Е.В. Зенков

Содержание

1 Основные понятия.

1.1 Состояния. Принцип суперпозиции. Вероятности и средние значения.

Состояние системы задано, когда определены значения всех её физических параметров, которые (в принципе) могут быть измерены одновременно. [1] Классический способ описания основан на *принципе детерминизма*, согласно которому начальные условия однозначно предопределяют состояние системы во все моменты времени. Поведение квантовых систем не может быть понято на основе такого подхода. Напротив, опыт показывает, что в наборе (ансамбле) одинаковых квантовых систем, поставленных в тождественные начальные условия (степень этой тождественности можно проконтролировать только на *макроскопическом* уровне !), почти всегда будет наблюдаться разброс по значениям физических величин, который не может быть объяснён погрешностью эксперимента. [2] Источником такой принципиально неустранимой неопределённости является тот факт, что для наблюдения всякого события, происходящего в микромире, его необходимо усиливать с помощью некоторого устройства, заведомо состоящего из макроскопически большого числа атомов. Взаимодействия же каждого из этих атомов с изучаемой квантовой системой снова представляют собой микроскопические явления, не поддающиеся "прямому" наблюдению и учёту. Таким образом, при заданном начальном состоянии $|\psi\rangle$ возможны различные конечные состояния $|\varphi_k\rangle$, что можно записать в виде:

$$|\psi\rangle \,=\, \alpha_1\,|\varphi_1\rangle \,+\, \alpha_2\,|\varphi_2\rangle \,+\, \dots\, \alpha_n\,|\varphi_n\rangle\, \dots\, . \tag{1}$$

В этом случае говорят, что состояние $|\psi\rangle$ является *суперпозицией* состояний $|\varphi_k\rangle$. Физический смысл соотношения (1) состоит в том, что если $|\varphi_k\rangle$ –

[1] Здесь слово *одновременно* означает, что результаты измерений не зависят от порядка, в котором они производятся. Эта оговорка важна в связи с соотношениями неопределённостей. Так, декартова коордната x и канонически - сопряжённый к ней импульс p_x принципиально не могут быть одновременно измерены сколь угодно точно. Ввиду того, что процесс измерения координаты обязательно вносит случайную погрешность в импульс (и наоборот), результаты измерений x и p_x всегда будут зависеть от их порядка.

[2] Исключением является случай, когда физическая величина F – интеграл движения, $\left[\widehat{H},\,\widehat{F}\right] = 0$, где $\widehat{H}$ – гамильтониан, а состояние системы $|\psi\rangle$ является стационарным (т.е. собственным для $\widehat{H}$, а значит и для $\widehat{F}$). В этом случае разброса по величине F нет: все системы ансамбля характеризуются одним и тем же значением $F = f$.

такие вектора состояний, которые являются собственными для оператора физической величины F, т.е.

$$\boxed{\widehat{F}\,|\varphi_k\rangle = f_k\,|\varphi_k\rangle},$$

($k = 1,\, 2\ldots$), то система, находящаяся сначала в состоянии (1), может при измерении величины F *иногда* показывать одно, а *иногда* – другое из возможных значений f_k. Вероятность (относительная частота) появления результата $F = f_i$ в серии измерений определяется коэффициентом α_i, который называется *амплитудой вероятности*:

$$\boxed{\text{Вер.}(F = f_i) \;=\; |\alpha_i|^2 \;=\; |\langle\varphi_i|\psi\rangle|^2} \tag{2}$$

Второе равенство справедливо, если конечные состояния образуют ортонормированный набор : $\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle \;=\; \delta_{i\,j}$. Среднее значение величины F по ансамблю с начальным состоянием $|\psi\rangle$ равно:

$$\boxed{\langle F\rangle_\psi \;=\; \sum_i \text{Вер.}(F = f_i)\,f_i \;=\; \langle\psi|\widehat{F}|\psi\rangle} \tag{3}$$

1.2 Нестационарное уравнение Шрёдингера.

Пусть в момент времени $t = 0$ состояние системы есть $|\psi\rangle_0$. Состояние в последующие моменты $|\psi\rangle_t$ находится из *нестационарного* уравнения Шрёдингера:

$$i\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,|\psi\rangle_t \;=\; \widehat{H}\,|\psi\rangle_t, \tag{4}$$

где $\widehat{H}$ – гамильтониан системы. Если время не входит в него явным образом, решение можно представить в виде:

$$|\psi\rangle_t \;=\; \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\,\widehat{H}\,t\right)\,|\psi\rangle_0. \tag{5}$$

Операторную экспоненту в правой части (по очевидным причинам её называют *оператором эволюции*) иногда удаётся вычислить непосредственно. Это возможно, когда гамильтониан $\widehat{H}$ задан в виде матрицы, имеющей простые свойства, например если $\widehat{H}^n$ равно единичной матрице при некотором $n \geqslant 0$. В качестве примера рассмотрим матрицу $\widehat{A} \;=\; \left(\begin{smallmatrix}0&1\\1&0\end{smallmatrix}\right)$, для которой $\widehat{A}^2$ равно единичной матрице $\widehat{E}$. Тогда

$$\begin{aligned}\exp(\alpha\,\widehat{A}) &= \widehat{E} + \alpha\,\widehat{A} + \frac{1}{2!}\alpha^2\,\widehat{E} + \ldots \\ &= \left(\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\alpha^{2k}}{(2k)!}\right)\widehat{E} + \left(\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\alpha^{2k+1}}{(2k+1)!}\right)\widehat{A} = \begin{pmatrix}\cosh\alpha & \sinh\alpha\\ \sinh\alpha & \cosh\alpha\end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Правую часть (5) всегда можно записать в виде ряда по стационарным состояниям системы. Пусть $|\phi_k\rangle$ – стационарные состояния:

$$\widehat{H}\,|\phi_k\rangle = \varepsilon_k\,|\phi_k\rangle, \tag{6}$$

где индексом k сокращённо обозначена вся совокупность квантовых чисел, которые могут быть как дискретными, так и непрерывными. Уравнение (6) называется *стационарным* уравнением Шрёдингера. Очевидно, что $\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\,\widehat{H}\,t\right)\,|\phi_k\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\,\varepsilon_k\,t\right)\,|\phi_k\rangle$. Представим начальное состояние $|\psi\rangle_0$ в виде суперпозиции: $|\psi\rangle_0 = \sum_k c_k\,|\phi_k\rangle$, где коэффициенты разложения равны $c_k = \langle\phi_k|\psi_0\rangle$ (здесь по дискретным значениям k берётся сумма, по непрерывным – интеграл). Тогда сразу получаем:

$$|\psi\rangle_t = \sum_k c_k\,e^{-\frac{i}{\hbar}\,\varepsilon_k\,t}\,|\phi_k\rangle. \tag{7}$$

1.3 Уравнение Гайзенберга.

Экспериментально наблюдаемые величины обычно выражаются в виде матричных элементов операторов. На основании (5) можно записать:

$$\langle\chi_t|\widehat{F}|\psi_t\rangle = \langle\chi_0|e^{\frac{i}{\hbar}\,\widehat{H}\,t}\,\widehat{F}\,e^{-\frac{i}{\hbar}\,\widehat{H}\,t}|\psi_0\rangle.$$

В этом выражении зависимость от времени можно перенести с волновых функций на операторы, вводя по определению оператор

$$\widehat{F}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\,\widehat{H}\,t}\,\widehat{F}\,e^{-\frac{i}{\hbar}\,\widehat{H}\,t}. \tag{8}$$

Это выражение называется оператором величины F в представлении Гайзенберга, или гайзенберговским оператором. Непосредственной проверкой можно убедиться, что $\widehat{F}(t)$ удовлетворяет *уравнению Гайзенберга*:

$$\boxed{\frac{d}{dt}\,\widehat{F}(t) = \frac{i}{\hbar}\,[\widehat{H},\,\widehat{F}(t)]} \tag{9}$$

которое называется также *уравнением движения* для оператора $\widehat{F}$. Если оператор $\widehat{F}$ в *правой* части (8) сам зависит от t, к правой части уравнения Гайзенберга добавляется частная производная $\partial\widehat{F}/\partial t$.

1.4 Принцип соответствия.

Пусть A $= A(q_1,\, q_2, \ldots;\, p_1,\, p_2, \ldots)$, $B = B(q_1,\, q_2, \ldots;\, p_1,\, p_2, \ldots)$ – две классические величины, зависящие от обобщённых координат q_i и соответствующих импульсов p_i, а C – их скобка Пуассона:

$$C \,=\, \{A,\, B\} \,\equiv\, \sum_{\forall\, i} \left(\frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} \,-\, \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} \right).$$

Тогда *операторы* этих трёх величин связаны соотношением:

$$\widehat{C} \,=\, -\frac{i}{\hbar}\, [\widehat{A}\, \widehat{B}].$$

Таким образом, соответствие между классическими величинами и их операторами имеет вид:

$$\boxed{\{\ ,\ \}_{\text{классич.}} \,\Leftrightarrow\, -\frac{i}{\hbar}\, [\ ,\ ]} \tag{10}$$

1.5 Момент импульса.

Приведём для справок основные формулы теории момента импульса.

Перестановочные соотношения для операторов декартовых компонент момента импульса:

$$[\widehat{L}_r,\, \widehat{L}_s] \,=\, i\hbar\, \epsilon_{rst}\, \widehat{L}_t, \tag{11}$$

где $\epsilon_{rst} = \pm 1$, если набор индексов $\{r,\, s,\, t\}$ образует (чётную / нечётную) перестановку и $\epsilon_{rst} = 0$, если среди индексов встречаются одинаковые.

Оператор квадрата момента:

$$\widehat{\mathbf{L}^2} = \widehat{L_x^2} + \widehat{L_y^2} + \widehat{L_z^2} = \widehat{L_z^2} + \widehat{L_z} + \widehat{L}_-\widehat{L}_+ = \widehat{L_z^2} - \widehat{L_z} + \widehat{L}_+\widehat{L}_-, \tag{12}$$

где $\widehat{L}_\pm \,=\, \widehat{L}_x \pm i\widehat{L}_y$, $[\widehat{L}_+,\, \widehat{L}_-] \,=\, 2\,\widehat{L}_z$. Выражения в сферической системе координат:

$$\widehat{L}_z \,=\, -i\,\hbar\, \frac{\partial}{\partial \phi}, \tag{13}$$

$$\widehat{L}_\pm \,=\, i\,\hbar\, e^{\pm i\,\phi} \left(\mp i\, \frac{\partial}{\partial \theta} \,+\, \operatorname{ctg}\theta\, \frac{\partial}{\partial \phi} \right). \tag{14}$$

Действие операторов момента на собственные функции операторов $\widehat{\mathbf{L}^2}$, $\widehat{L}_z$:

$$\widehat{\mathbf{L}^2} |l,\, m\rangle = \hbar^2\, l\,(l+1)\, |l,\, m\rangle, \quad \widehat{L}_z = \hbar\, m\, |l,\, m\rangle \tag{15}$$

$$\widehat{L}_\pm |l,\, m\rangle = \hbar^2\, \sqrt{l\,(l+1) \,-\, m\,(m \pm 1)}\, |l,\, m \pm 1\rangle. \tag{16}$$

Таблица 1: Нормированные сферические гармоники $Y_{l,m} = N_{l,m}\, y_{l,m}(\theta,\, \phi) = N_{l,m}\, y_{l,m}(x,\, y,\, z)$ в сферических и декартовых координатах ($r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$).

l	m	$N_{l,m}$	$y_{l,m}$
0	0	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$	1
1	0	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}}$	$\cos\theta = \frac{z}{r}$
	± 1	$\sqrt{\frac{3}{8\pi}}$	$\mp \sin\theta\, e^{\pm i\phi} = \mp \frac{x \pm iy}{r}$
2	0	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}}$	$3\cos^2\theta - 1 = \frac{3z^2 - r^2}{r^2}$
	± 1	$\sqrt{\frac{15}{8\pi}}$	$\mp \sin\theta\, \cos\theta\, e^{\pm i\phi} = \mp \frac{z\,(x \pm iy)}{r^2}$
	± 2	$\sqrt{\frac{15}{32\pi}}$	$\sin^2\theta\, e^{\pm 2i\phi} = \frac{(x \pm iy)^2}{r^2}$

Таблица 2: Радиальные волновые функции водородоподобного атома. $\rho_n = (2Z/n\, a_0) r$, где $a_0 = \hbar^2/m\, e^2 \simeq 0.519$ Å– боровский радиус

n	l	$R_{n,l}(\rho)$
1	0	$\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} 2\, e^{-\rho_1/2}$
2	0	$\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{1}{2\sqrt{2}}\,(2 - \rho_2)\, e^{-\rho_2/2}$
2	1	$\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{1}{2\sqrt{6}}\, \rho_2\, e^{-\rho_2/2}$
3	0	$\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{1}{9\sqrt{3}}\,(6 - 6\,\rho_3 + \rho_3^2)\, e^{-\rho_3/2}$
3	1	$\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{1}{9\sqrt{6}}\,(4 - \rho_3)\, \rho_3\, e^{-\rho_3/2}$
3	2	$\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{1}{9\sqrt{30}}\, \rho_3^2\, e^{-\rho_3/2}$

2 Операторный формализм.

2.1. Раскройте скобки в операторных выражениях: а) $\left(x + \dfrac{d}{dx}\right)\left(x - \dfrac{d}{dx}\right)$; б) $\left(\frac{1}{x} + \dfrac{d}{dx}\right)^2$; с) $\left(x\,\dfrac{d}{dx}\right)$; д) $\left(\dfrac{d}{dx}\,x\right)^2$.

2.2. Выразите коммутатор $[A\,B,\, C]$ через $[A,\, C]$ и $[B,\, C]$

2.3. Покажите, что след произведения матриц инвариантен относительно их циклической перестановки: а) $\mathrm{Sp}(A\,B) = \mathrm{Sp}(B\,A)$; б) $\mathrm{Sp}(A\,B\,C) = \mathrm{Sp}(C\,A\,B)$ и т.д.

2.4. Покажите, что эрмитово сопряжение от произведения операторов выполняется по правилу:

$$(A\,B)^+ = B^+\,A^+.$$

2.5. а) Пусть a_i – собственные значения матрицы $\widehat{A}$. Упростите матричное произведение

$$\prod_i \left(\widehat{A} - a_i\,\widehat{E}\right),$$

где $\widehat{E}$ – единичная матрица.

б) Выясните смысл операторного выражения

$$\prod_{\forall\, a_i \neq a_0} \frac{\widehat{A} - a_i}{a_0 - a_i},$$

где произведение берётся по всем собственным значениям a_i, кроме одного избранного (a_0). Для этого рассмотрите его действие на произвольный вектор $|\psi\rangle$, разложив его по базису собственных векторов $|a_i\rangle$ оператора $\widehat{A}$.

2.6. Получите явное выражение для оператора $\left(\dfrac{\partial}{\partial\theta}\right)^+$, где θ – угол между радиус-вектором $\mathbf{r}$ и осью z в сферической системе координат.

2.7. Оператор x-компоненты импульса имеет вид: $\widehat{p}_x = -i\,\hbar\,\dfrac{\partial}{\partial x}$. По аналогии можно было бы предположить, что оператор радиальной компоненты импульса $\widehat{p}_r$ должен записываться в виде: $-i\,\hbar\,\dfrac{\partial}{\partial r}$. Однако этот оператор не эрмитов, поэтому определим $\widehat{p}_r$ как $-\dfrac{\hbar}{2}\left[i\,\dfrac{\partial}{\partial r} + \left(i\,\dfrac{\partial}{\partial r}\right)^+\right]$. Получите явное выражение для этого оператора и запишите оператор радиальной части кинетической энергии. Сравните полученный результат с выражением для оператора Лапласа в сферической системе координат.

2.8. Получите формулу (теорема Гельмана-Фейнмана):

$$\langle\psi_n|\frac{\partial\,\widehat{H}}{\partial\,\lambda}|\psi_n\rangle \;=\; \frac{\partial\,E_n}{\partial\,\lambda},$$

где $\widehat{H}\,|\psi_n\rangle \;=\; E_n\,|\psi_n\rangle$, λ – параметр, входящий гамильтониан $\widehat{H}$ (а значит и в собственные значения энергии E_n).

2.9. Получите выражение для плотности тока при движении частицы с зарядом e в магнитном поле. Для этого с помощью нестационарного уравнения Шрёдингера рассмотрите изменение со временем вероятности нахождения частицы внутри ограниченной области объёма V: $\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_V|\psi(\mathbf{r})|^2\,d\mathbf{r}$. Гамильтониан имеет вид: $\widehat{H} = \frac{1}{2m}\left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + U(\mathbf{r})$, где $\mathbf{A}$ – векторный потенциал магнитного поля.

2.10. Вычислите коммутатор: $\left[\widehat{x},\, e^{\frac{i}{\hbar}\,\widehat{p}_x\,a}\right]$. Пусть $|x'\rangle$ – собственная функция оператора координаты: $\widehat{x}\,|x'\rangle \;=\; x'\,|x'\rangle$. На основе полученного результата покажите, что $e^{\frac{i}{\hbar}\,\widehat{p}_x\,a}\,|x'\rangle$ – также является его собственной функцией. Какому собственному значению она соответствует ?

2.11. Пусть $\widehat{x}(t)$ – зависящий от времени гайзенберговский оператор координаты *свободной* частицы. Вычислите коммутатор:

$$[\widehat{x}(t),\,\widehat{x}(0)].$$

Для решения нижеследующих задач представьте оператор импульса в виде: $\widehat{p}_i \;=\; \frac{d}{dt}\widehat{r}_i$ $(i \;=\; x,\,y,\,z)$ и воспользуйтесь уравнением Гайзенберга для оператора координаты.

2.12. Покажите, что в стационарном состоянии дискретного спектра среднее значение импульса всегда равно нулю: $\langle\psi_n|\widehat{p}_i|\psi_n\rangle$.

2.13. Покажите, что матричные элементы операторов одноимённых декартовых компонент импульса и радиус-вектора частицы всегда связаны соотношением:

$$\langle\psi_k|\widehat{p}_x|\psi_n\rangle \;=\; \frac{i\,m}{\hbar}\,(E_k \,-\, E_n)\,\langle\psi_k|\widehat{x}|\psi_n\rangle,$$

где ψ_n, E_n – волновые функции и уровни энергии дискретного спектра (m – масса частицы).

2.14. Покажите справедливость *правила сумм Томаса – Райха – Куна*:

$$\sum_n \frac{2\,m\,|\langle\psi_n|\widehat{x}|\psi_0\rangle|^2}{\hbar^2}\,(E_n\,-\,E_0)\,=\,1,$$

где сумма берётся по полному набору стационарных состояний ψ_n с энергией E_n частицы массы m; индексом $''0''$ обозначено основное состояние. Указание: рассмотрите перестановочные соотношения для операторов импульса и координаты.

3 Вероятности и средние значения.

3.1. Частица заключена в непроницаемом кубе с длиной ребра L. Вычислите давление частицы на стенки, считая, что частица находится в основном состоянии.

Указание: приращение объёма полости связано с изменением энергии соотношением: $dE = -p\,dV$, где p – давление.

3.2. Составьте уравнение движения для *оператора вириала* $\widehat{W} = \dfrac{1}{2}\,(\widehat{\mathbf{r}}\cdot\widehat{\mathbf{p}}\,+\,\widehat{\mathbf{p}}\cdot\widehat{\mathbf{r}})$ и получите *теорему вириала*:

$$\langle\psi_n|\frac{\mathbf{p}^2}{2m}|\psi_n\rangle\,=\,\frac{1}{2}\,\langle\psi_n|\,\mathbf{r}\cdot\nabla\,V(\mathbf{r})|\psi_n\rangle,$$

где ψ_n – стационарные состояния дискретного спектра системы с гамильтонианом $\widehat{H}\,=\,\dfrac{p^2}{2m}\,+\,V(\mathbf{r})$.

3.3. С помощью теоремы вириала установите соотношение между средним значением кинетической и потенциальной энергии в том случае, когда последняя имеет вид: $V = V_0\,r^n$. В частности, рассмотрите случаи: $n = 2$ (гармонический осциллятор); $n = -1$ (кулоновское взаимодействие).

3.4. Частица находится в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной a. Вычислите среднюю энергию и распределение по энергиям в состоянии $\psi = A\,x\,(x-a)$, где А – нормировочный множитель. Вычислите $\langle x\rangle$ и $\langle x^2\rangle$ и сравните его с результатом классического расчёта.

Решение второй части задачи. Классическая частица двигается с постоянной скоростью v, направление которой меняется на противоположное в момент столкновения со стенкой. Время пролёта между стенками равно $T = a/v$. Очевидно, что вероятность $P(x)\,dx$ обнаружить частицу в области $(x,\, x + dx)$ равна доле времени, в течение которого частица проходит её: $P(x)\,dx = dt/T$. Таким образом, классическое среднее значение координаты равно: $\langle x \rangle_{\text{кл.}} = \int\limits_0^a x\,P(x)\,dx = \int\limits_0^T (v\,t)\,dt/T = a/2$. Аналогично вычисляется $\langle x^2 \rangle_{\text{кл.}}$.

3.5. Волновая функция частицы имеет вид: $\psi = const.\exp(i\,k\,x - x^2/2a^2)$. Определите функции распределения по координатам и по импульсам для частицы в таком состоянии. Изобразите приближённо на графике вид распределений при очень маленьких и очень больших значениях a.

3.6. В начальный момент времени измерение зафиксировало частицу в точке $x_0 = 0$ и волновая функция имела вид: $\psi(x,\, t = 0) \sim \exp(-x^2/\Delta^2)$, где исходная неопределённость координаты Δ очень мала. Изучите поведение плотности вероятности $\rho(x,\, t)$ с течением времени для свободной частицы.

3.7. В начальный момент времени t_0 измерение зафиксировало частицу в точке x_0. В дальнейшем частица ведёт себя как свободная. Вычислите вероятность обнаружения частицы в момент t_1 в точке x_1.

3.8. Сформулируйте условие, при котором в одномерной прямоугольной потенциальной яме ширины a и глубины U содержится не менее 5 энергетических уровней.

3.9. Сформулируйте условие, при котором в сферической потенциальной яме ($U(r \leqslant a) = -U_0$, $U(r > a) = 0$) содержится по крайней мере один энергетический уровень.

3.10. Вычислите среднее значение и дисперсию кинетической и потенциальной энергии $1s$- электрона в атоме водорода.

3.11. Вычислите электростатический потенциал и напряжённость электрического поля, порождаемого атомом водорода в $1\,s$ - состоянии. Исследуйте случаи: 1. $r \ll a_0$, 2. $r \gg a_0$ (a_0 - боровский радиус).

3.12. Применяя теорему Гельмана-Фейнмана, вычислите:

1. Среднее значение кинетической и потенциальной энергии одномерного гармонического осциллятора.

2. Среднее значение кинетической, кулоновской и центробежной энергии электрона в атоме водорода в определённом $|n, l, m\rangle$- состоянии.

3.13. Вычислите полную вероятность нахождения $2p$-электрона в атоме водорода в той области пространства, которая должна быть недоступной для него с точки зрения классической механики.

4 Линейный гармонический осциллятор. Бозе-операторы.

Пара операторов – $\widehat{a}$ и эрмитово-сопряжённый к нему $\widehat{a}^+$ – называются операторами Бозе, если их коммутатор имеет вид:

$$\left[\widehat{a},\, \widehat{a}^+\right] \,=\, 1 \tag{17}$$

Их называют также операторами Фока, операторами рождения и уничтожения, повышения и понижения, лестничными операторами. Смысл этих названий выяснится ниже.

Операторы $\widehat{a}$, $\widehat{a}^+$ и $\widehat{n} \,\equiv\, \widehat{a}^+\widehat{a}$ играют фундаментальную роль в квантовой механике, особенно в теории систем с большим числом степеней свободы (многочастичные системы, поля).

4.1. Найти спектр собственных значений и собственные функции оператора $\widehat{n}$.

Решение. В первую очередь, видим, что оператор $\widehat{n}$ – эрмитов, поэтому СЗ – вещественные. Кроме того, они *не отрицательные*. В самом деле, скалярно умножая уравнение

$$\widehat{n}\,|\phi_\lambda\rangle \,=\, \lambda\,|\phi_\lambda\rangle \tag{18}$$

слева на собственную функцию, имеем:

$$\langle\phi_\lambda|\widehat{a}^+\,\widehat{a}|\phi_\lambda\rangle \,=\, \langle\widehat{a}\,\phi_\lambda|\widehat{a}\,\phi_\lambda\rangle \,=\, ||\widehat{a}\,\phi_\lambda||^2 \,=\, \lambda\,||\phi_\lambda||^2. \tag{19}$$

В первом равенстве было использовано определение эрмитова сопряжения. Таким образом, собственное значение λ равно отношению двух заведомо неотрицательных величин.

Итак, пусть одно СЗ существует. Действуя на обе части уравнения (18) оператором $\widehat{a}$ и применяя перестановочное соотношение (17), находим: $\widehat{n}\,\widehat{a}\,|\phi_\lambda\rangle \,=\, (\lambda - 1)\,\widehat{a}\,|\phi_\lambda\rangle$. Это значит, что число $\lambda - 1$ также является собственным значением, а соответствующая ему собственная функция имеет вид: $|\phi_{\lambda-1}\rangle \, = \, const.\, \widehat{a}\,|\phi_\lambda\rangle$. Константу нормировки $const = \langle\widehat{a}\,\phi_\lambda|\widehat{a}\,\phi_\lambda\rangle^{-1/2}$ сразу находим из (19): считая исходную функцию $|\phi_\lambda\rangle$ нормированной, видим, что $const. \, = \, 1/\sqrt{\lambda}$. В результате, получаем рекуррентное соотношение между собственными функциями: $\widehat{a}\,|\phi_\lambda\rangle \, = \, \sqrt{\lambda}\,|\phi_{\lambda-1}\rangle$.

Таким образом, если существует хотя бы одно собственное значение λ, то числа $\lambda-1$, $\lambda-2$ ... и т.д. также – собственные значения, причём все они должны быть неотрицательными. Фактически, это возможно только при условии, что процесс "вычитания единиц", осуществляемый последовательным действием оператора $\widehat{a}$ (именно поэтому он и называется оператором понижения, или уничтожения) должен прерваться: должно существовать такое наименьшее допустимое значение значение $0 \leqslant \lambda_{min} < 1$, при котором $|\phi_{\lambda_{min}-1}\rangle \, = \, 0$, что эквивалентно условию: $\widehat{a}\,|\phi_{\lambda_{min}}\rangle \, = \, 0$. Действуя на это соотношение оператором $\widehat{a}^+$, находим: $\widehat{n}\,|\phi_{\lambda_{min}}\rangle \, = \, 0$. Но это значит, что $\lambda_{min} \, = \, 0$.

Подведём итоги. Спектр СЗ оператора $\widehat{n}$ – целые неотрицательные числа: $0, \, 1, \, 2, \ldots$. Отвечающие им собственные функции находятся из соотношений:

$$\widehat{a}\,|\phi_0\rangle \, = \, 0, \tag{20}$$

$$\widehat{a}\,|\phi_k\rangle \, = \, \sqrt{k}\,|\phi_{k-1}\rangle, \tag{21}$$

$$\widehat{a}^+\,|\phi_k\rangle \, = \, \sqrt{k+1}\,|\phi_{k+1}\rangle. \tag{22}$$

(Проверьте последнее равенство !)

4.2. Запишите гамильтониан линейного гармонического осциллятора через Бозе-операторы.

Решение. Преобразуем исходный гамильтониан, $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\,\omega^2\,x^2}{2}$ к виду: $H = \varepsilon_0\,a^+\,a \, + \, \varepsilon_1$, причём оператор координаты будем искать линейной комбинации: $x = \alpha\,a \, + \, \beta\,a^+$. Для нахождения параметров α, β и ε_0 составим уравнения движения:

$$\frac{dx}{dt} \, = \, \frac{i}{\hbar}\,[H,\, x] \, = \, \frac{p}{m} \, = \, \frac{i}{\hbar}\,\varepsilon_0\,[a^+ a,\, \alpha\,a + \beta\,a^+] \, = \, \frac{i\,\varepsilon_0}{\hbar}\,(\beta\,a^+ \, - \, \alpha\,a).$$

Таким образом, при выбранной форме оператора координаты, оператор импульса должен принять вид: $p = \frac{i\,m\,\varepsilon_0}{\hbar}\,(\beta\,a^+ \, - \, \alpha\,a)$. При этом,

$$\frac{dp}{dt} \, = \, \frac{i}{\hbar}\,[H,\, p] \, = \, -m\,\omega^2\,x \, = \, -\frac{m\,\varepsilon_0^2}{\hbar^2}\,[a^+ a,\, \beta\,a^+ - \alpha\,a] \, = \, -\frac{m\,\varepsilon_0^2}{\hbar^2}\,(\beta\,a^+ - \alpha\,a).$$

Отсюда находим: $\varepsilon_0 = \hbar\,\omega$. Наконец,

$$[p,\, x] \, = \, \frac{i\,m\,\varepsilon_0}{\hbar}\,[\beta\,a^+ - \alpha\,a,\, \alpha\,a + \beta\,a^+] = -i\,\hbar,$$

откуда

$$\alpha\,\beta = \frac{\hbar}{2\,m\,\omega}.$$

Таким образом, выбор параметров α и β допускает элемент произвола. Положим $\alpha = \beta = \sqrt{\frac{\hbar}{2\,m\,\omega}}$. В этом случае

$$x \;=\; \sqrt{\frac{\hbar}{2\,m\,\omega}}\,(a^+ \,+\, a), \tag{23}$$

$$p \;=\; i\,\sqrt{\frac{\hbar\,m\,\omega}{2}}\,(a^+ \,-\, a). \tag{24}$$

Найдём параметр ε_1. Очевидно, что $\varepsilon_1 = \langle 0|H|0\rangle$, где $|0\rangle$ – основное состояние: $a\,|0\rangle = 0$. Пользуясь определением бозе-операторов, $[a,\,a^+] = 1$ и выражениями для x, p, легко видеть, что $\langle 0|x^2|0\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}$, $\langle 0|p^2|0\rangle = \hbar\,m\,\omega/2$. Отсюда $\varepsilon_1 = \hbar\,\omega/2$. В итоге,

$$H = \hbar\,\omega\,\left(a^+ a \,+\, \frac{1}{2}\right). \tag{25}$$

Соответственно, для оператора a получаем выражение:

$$a \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\,\omega}{\hbar}}\,\widehat{x} \,+\, \frac{i}{\sqrt{\hbar\,m\,\omega}}\,\widehat{p}\right) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{d}{dq} \,+\, q\right), \tag{26}$$

где $q = x\,(m\,\omega/\hbar)^{1/2}$ – безразмерная координата. Комбинацию $\ell = \sqrt{\dfrac{\hbar}{m\,\omega}}$, имеющую размерность длины, иногда называют *длиной осциллятора*.

Учитывая, что спектр оператора a^+a – целые неотрицательные числа, сразу же находим уровни энергии осциллятора:

$$\varepsilon_n \;=\; \hbar\,\omega\,\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0,\,1,\,2\,\ldots.$$

На основе результатов задачи 4.1 строим стационарные волновые функции:

$$\left(\frac{d}{dq} \,+\, q\right)\,\psi_0(q) \;=\; 0, \tag{27}$$

$$\psi_n(q) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{d}{dq} \,+\, q\right)\,\psi_{n-1}(q). \tag{28}$$

4.3. Вычислите энергетический спектр системы с гамильтонианом:

$$\widehat{H} \,=\, \varepsilon_0\, a^+ a \,+\, \varepsilon_1\, (a^+ a^+ \,+\, a\, a).$$

<u>Решение:</u> Преобразуем гамильтониан к виду: $\widehat{H} \,=\, E_0\, A^+ A \,+\, E_1$ путём перехода к новым бозе-операторам A, A^+, которые линейно связаны с исходными: $a = \alpha\, A + \beta\, A^+$, $a^+ = \alpha^*\, A^+ + \beta^*\, A$. Это является частным случаем т.н. *преобразования Боголюбова*. Из условия: $[a,\, a^+] \,=\, [A,\, A^+] \,=\, 1$, следует, что $|\alpha|^2 - |\beta|^2 = 1$. Далее будем α и β считать вещественными. Для нахождения α, β и E_0 составим коммутатор: $[H,\, a] \,=\, -\varepsilon_0\, a \,-\, 2\,\varepsilon_1\, a^+ \,\equiv\, E_0\, (-\alpha\, A + \beta\, A^+)$, или $\varepsilon_0\, (\alpha\, A + \beta\, A^+) + 2\,\varepsilon_1\, (\alpha\, A^+ + \beta\, A) \,=\, E_0\, (\alpha\, A - \beta\, A^+)$. Приравнивая коэффициенты при A, A^+ слева и справа, получаем систему:

$$\begin{aligned} \alpha\,\varepsilon_0 \,+\, 2\,\beta\,\varepsilon_1 \,&=\, \alpha\, E_0, \\ 2\,\alpha\,\varepsilon_1 \,+\, \beta\,\varepsilon_0 \,&=\, -\beta\, E_0, \end{aligned}$$

условие разрешимости которой имеет вид:

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_0 - E_0 & 2\,\varepsilon_1 \\ 2\,\varepsilon_1 & \varepsilon_0 + E_0 \end{vmatrix} \,=\, 0.$$

Отсюда $E_0 \,=\, \varepsilon_0 \sqrt{1 - 4\,\varepsilon_1^2/\varepsilon_0^2}$. Найдём теперь E_1. Очевидно, что $E_1 \,=\, \langle 0|H|0\rangle$, где $|0\rangle$ – основное состояние системы: $A\,|0\rangle = 0$. Последнее равенство показывает, что $a\,|0\rangle = \beta\, A^+|0\rangle$. Но тогда $\langle 0|a^+ a|0\rangle = \beta^2\,\langle 0|A\, A^+|0\rangle = \beta^2$, $\langle 0|a\, a|0\rangle \,=\, \beta\,\langle 0|(\alpha\, A \,+\, \beta\, A^+)\, A^+|0\rangle \,=\, \alpha\,\beta\,\langle 0|A\, A^+|0\rangle \,=\, \alpha\,\beta$ и $\langle 0|a^+ a^+|0\rangle \,=\, \alpha\,\beta$. Отсюда $E_1 \,=\, \varepsilon_0\,\beta^2 \,+\, 2\,\alpha\,\beta\,\varepsilon_1$. Чтобы найти α, β, вернёмся к определяющей их системе уравнений. Видим, что $\beta/\alpha \,=\, (E_0 - \varepsilon_0)/(2\,\varepsilon_1)$. Тогда $\alpha^2 - \beta^2 \,=\, \alpha^2 \left(1 - \frac{(E_0-\varepsilon_0)^2}{4\,\varepsilon_1^2}\right) \,=\, 1$. Введём обозначения: $\Delta \,=\, \varepsilon_1/\varepsilon_0$, $\eta \,=\, \sqrt{1 - 4\Delta^2}$. Мы находим тогда, что $E_0 \,=\, \varepsilon_0\,\eta$ и $E_1 \,=\, \varepsilon_0 \left(\frac{(\eta-1)^2}{4\Delta^2} + \eta - 1\right) / \left(1 - \frac{(\eta-1)^2}{4\Delta^2}\right)$, что можно привести к виду: $E_1 = \varepsilon_0(\eta - 1)/2$. В итоге, гамильтониан принимает вид:

$$H = \varepsilon_0\,(\eta\, A^+ A \,+\, (\eta - 1)/2) = \varepsilon_0 \sqrt{1 - 4\,\varepsilon^2/\varepsilon_0^2}\, \left(A^+ A \,+\, \frac{1}{2}\right) - \varepsilon_0/2.$$

Очевидно теперь, что энергетический спектр имеет вид:

$$E_n \,=\, \varepsilon_0 \sqrt{1 - 4\,\varepsilon^2/\varepsilon_0^2}\, \left(n \,+\, \frac{1}{2}\right) - \frac{\varepsilon_0}{2}, \quad n = 0,\, 1,\, 2,\, \ldots.$$

4.4. Методом Бозе-операторов (формулы 23, 24) постройте матрицы операторов $\widehat{x}$, $\widehat{p}_x$ на базисе стационарных состояний осциллятора с $n = 0, 1, \ldots n_{max}$ и вычислите их коммутатор. Покажите, что ни для каких матриц *конечных* размеров коммутатор не может быть пропорционален единичной матрице.

Указание: для решения второй части задачи рассмотрите шпур левой и правой части перестановочного соотношения для $\widehat{x}$ и $\widehat{p}_x$.

4.5. Получите выражения для гайзенберговских операторов $\widehat{a}(t)$, $\widehat{a}^+(t)$, а также $\widehat{x}(t)$ и $\widehat{p}_x(t)$.

4.6. В начальный момент времени $t = 0$ гармонический осциллятор был смещён на величину a из положения равновесия и приведён в состояние $\exp\left(-\frac{i\widehat{p}a}{\hbar}\right)|0\rangle$, где $\widehat{p}$ – оператор импульса. Пользуясь гайзенберговским представлением, вычислите $\langle x\rangle$ при $t > 0$.

4.7. *Временнóй корреляционной функцией* координаты называется выражение:

$$C(t) = \langle\widehat{x}(t)\,\widehat{x}(0)\rangle,$$

где $\widehat{x}(t)$ – зависящий от времени оператор координаты в представлении Гайзенберга. Вычислите эту корреляционную функцию для основного состояния одномерного гармонического осциллятора.

4.8. Покажите, что

$$\langle 0|e^{i\,k\,x}|0\rangle = \exp\left(-k^2\,\langle 0|x^2|0\rangle/2\right),$$

где $|0\rangle$ – основное состояние гармонического осциллятора.

4.9. *Когерентным* называется состояние, собственное для оператора понижения:

$$\widehat{a}\,|\Psi_\lambda\rangle = \lambda\,|\Psi_\lambda\rangle. \tag{29}$$

Покажите, что когерентное состояние обладает следующими свойствами:

1. $|\Psi_\lambda\rangle = e^{\lambda\,\widehat{a}^+}\,|0\rangle$
2. $\widehat{a}^+\,|\Psi_\lambda\rangle = \dfrac{\partial}{\partial\,\lambda}\,|\Psi_\lambda\rangle$
3. $e^{c\,\widehat{a}^+}\,|\Psi_\lambda\rangle = |\Psi_{\lambda+c}\rangle$

4. $|\Psi_\lambda\rangle \,=\, \sum\limits_n \dfrac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}\,|n\rangle$

5. $\langle\Psi_\lambda|\Psi_{\lambda'}\rangle \,=\, e^{\lambda^*\lambda'}$

Здесь $|n\rangle$ $(n = 0,\,1,\,2,\ldots)$ – собственные функции оператора $\widehat{n} = \widehat{a}^+\,\widehat{a}$.

4.10. Получите явное выражение для волновой функции нормированного когерентного состояния в координатном представлении, $\psi_\lambda(x,\,t)$.

Указание: Для нахождения $\psi_\lambda(x,\,t=0)$ рассмотрите формулы (26, 29).

4.11. Вычислите среднее значение энергии гармонического осциллятора в когерентном состоянии и найдите распределение по энергиям.

Решение. Гамильтониан гармонического осциллятора записывается в виде: $\widehat{H} \,=\, \hbar\omega\left(\widehat{n} \,+\, \dfrac{1}{2}\right)$. Чтобы найти среднее значение энергии $\langle\varepsilon\rangle \,=\, \langle\Psi_\lambda|\widehat{H}|\Psi_\lambda\rangle$, необходимо вычислить диагональный матричный элемент оператора $\widehat{n}$. Имеем: $\langle\Psi_\lambda|\widehat{n}|\Psi_\lambda\rangle \,=\, \langle\Psi_\lambda|\widehat{a}^+\,\widehat{a}|\Psi_\lambda\rangle \,=\, \langle\widehat{a}\,\Psi_\lambda|\widehat{a}\,\Psi_\lambda\rangle \,=\, |\lambda|^2$. Таким образом, среднее значение энергии в когерентном состоянии с параметром λ равно $\langle\varepsilon\rangle \,=\, \hbar\omega\,(|\lambda|^2 \,+\, 1/2)$.

Найти распределение осциллятора по энергиям – значит определить вероятность P_n того, что при измерении энергии осциллятора будет получено значение $\varepsilon_n \,=\, \hbar\omega\,(n \,+\, 1/2)$, а сам он окажется в стационарном состоянии $|n\rangle$. Согласно принципам квантовой механики, искомая вероятность равна $P_n \,=\, |\langle n|\Psi_\lambda\rangle|^2$. На основе определения (29) имеем: $\lambda\,\langle n|\Psi_\lambda\rangle \,=\, \langle n|\widehat{a}|\Psi_\lambda\rangle \,=\, \langle\widehat{a}^+\,n|\Psi_\lambda\rangle \,=\, \sqrt{n+1}\,\langle n+1|\Psi_\lambda\rangle$. Таким образом, получаем рекуррентное соотношение:

$$\langle n+1|\Psi_\lambda\rangle \,=\, \frac{\lambda}{\sqrt{n+1}}\,\langle n|\Psi_\lambda\rangle \,=\, \ldots \,=\, \frac{\lambda^{n+1}}{\sqrt{(n+1)!}}\langle 0|\Psi_\lambda\rangle.$$

Отсюда

$$P_n \,=\, P_0\,\frac{|\lambda|^{2n}}{n!},$$

что соответствует распределению Пуассона. Из условия нормировки $\sum\limits_{n=0}^{\infty} P_n \,=\, 1$ находим: $P_0\,\sum\limits_{n=0}^{\infty}\frac{|\lambda|^{2n}}{n!} \,=\, P_0\,e^{|\lambda|^2} \,=\, 1$. Окончательно:

$$P_n \,=\, e^{-|\lambda|^2}\,\frac{|\lambda|^{2n}}{n!}.$$

4.12. Вычислите среднее значение $\langle x\rangle_t$ и дисперсию координаты $\Delta x_t = \left(\langle x^2\rangle_t - \langle x\rangle_t^2\right)^{1/2}$ одномерного осциллятора при $t \geqslant 0$, если при $t = 0$ осциллятор находился в состоянии: $|\psi_0\rangle$:

1. $|\psi_0\rangle = |0\rangle$;
2. $|\psi_0\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\Big(|0\rangle + |1\rangle\Big)$;
3. $|\psi_0\rangle$ – (*нормированное*) когерентное состояние с параметром λ.

Проанализируйте полученные результаты.

4.13. Рассчитайте соотношение неопределённостей Гайзенберга для осциллятора в когерентном состоянии.

4.14. Гамильтониан трёхмерного изотропного гармонического осциллятора имеет вид:

$$\widehat{H} \;=\; \frac{1}{2m}\left(\widehat{p}_x^2 + \widehat{p}_y^2 + \widehat{p}_z^2\right) \;+\; \frac{m\,\omega^2}{2}\left(\widehat{x}^2 + \widehat{y}^2 + \widehat{z}^2\right).$$

Запишите операторы декартовых компонент момента импульса осциллятора $\widehat{L}_i$ через Бозе-операторы $\widehat{a}_i$, $\widehat{a}_i^+$ $(i = x,\, y,\, z)$.

4.15. Гамильтониан частицы, находящейся в постоянном однородном магнитном поле $\mathbf{B} \parallel \mathbf{z}$ записывается в виде:

$$\widehat{H} = \frac{1}{2m}\left(\widehat{\mathbf{p}} \,-\, \frac{e}{c}\,\mathbf{A}\right)^2,$$

где m, e – соответственно масса и заряд частицы, $\mathbf{A}$ – векторный потенциал магнитного поля.

1. Покажите, что $(A_x,\, A_y,\, A_z)$ можно выбрать в виде: ${}^1\!/_2\, B\,(-y,\, x,\, 0)$.
2. Вычислите коммутатор
$$[\widehat{\Pi}_x,\, \widehat{\Pi}_y],$$
где $\widehat{\Pi} = \widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\,\mathbf{A}$. На основании полученного результата сведите задачу к модели осциллятора и покажите, что точные значения энергии имеют вид (*уровни Ландау*):
$$E_{k,\,n} \;=\; \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \;+\; \frac{|e|B\hbar}{mc}\,\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0,\, 1,\, 2\ldots$$
где $\hbar\, k$ – собственные значения оператора $\widehat{p}_z$, принимающие непрерывный ряд значений.

4.16. Постройте такие состояния трёхмерного изотропного гармонического осциллятора, в которых он имеет энергию $7/2\,\hbar\omega$ и определённые значения момента импульса.

<u>Решение.</u> Требуется найти состояния, собственные для операторов $\widehat{H}$, $\widehat{L^2}$ и $\widehat{L}_z$. Это возможно, поскольку эти операторы коммутируют, что становится очевидным, если учесть, что изотропный осциллятор можно рассматривать как частицу в *центральном* поле $U = m\,\omega^2\,r^2/2$. Гамильтониан записывается через Бозе-операторы как $\widehat{H} = \hbar\omega\,\sum_i \widehat{a}_i^+\,\widehat{a}_i$, а оператор z-компоненты момента импульса принимает вид: $\widehat{L}_z = i\,\hbar\,(\widehat{a}_y^+\,\widehat{a}_x - \widehat{a}_x^+\,\widehat{a}_y)$. Уровни энергии $\varepsilon_{n_x\,n_y\,n_z} = \hbar\omega\,(n_x + n_y + n_z + 3/2)$, а стационарные состояния будем обозначать $|n_x\,n_y\,n_z\rangle$. Энергетический уровень $7/2\,\hbar\omega$ имеет шестикратное вырождение, ему отвечают состояния с $n_x + n_y + n_z = 2$: $|2\,0\,0\rangle$, $|0\,2\,0\rangle$, $|0\,0\,2\rangle$, $|1\,1\,0\rangle$, $|0\,1\,1\rangle$, $|1\,0\,1\rangle$. Построим матрицу оператора $\widehat{L}_z$ на базисе этих 6 функций. Для этого рассмотрим предварительно результат его действия на них. Пользуясь правилами действия операторов $\widehat{a}_i$, $\widehat{a}_i^+$ на состояния $|n_i\rangle$, легко находим:

$$\begin{aligned}
&\widehat{L}_z\,|2\,0\,0\rangle = i\sqrt{2}\,|1\,1\,0\rangle, && \widehat{L}_z\,|0\,2\,0\rangle = -i\sqrt{2}\,|1\,1\,0\rangle\\
&\widehat{L}_z\,|0\,0\,2\rangle = 0, && \widehat{L}_z\,|1\,1\,0\rangle = i\sqrt{2}\,(|0\,2\,0\rangle - |2\,0\,0\rangle)\\
&\widehat{L}_z\,|0\,1\,1\rangle = -i\,|1\,0\,1\rangle, && \widehat{L}_z\,|1\,0\,1\rangle = i\,|0\,1\,1\rangle
\end{aligned}$$

Исходя из этих результатов, составляем матрицу:

$$\widehat{L}_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i\sqrt{2} & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & i\sqrt{2} & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\ i\sqrt{2} & -i\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & i\\ 0 & 0 & 0 & 0 & -i & 0 \end{pmatrix}$$

Её собственные значения равны: 0, 0, ± 1, ± 2. Соответствующие собственные вектора можно выбрать в виде:

$$\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix}1\\1\\1\\0\\0\\0\end{pmatrix},\ \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix}1\\1\\-2\\0\\0\\0\end{pmatrix},\ \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\0\\0\\0\\1\\-i\end{pmatrix},\ \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\0\\0\\0\\1\\i\end{pmatrix},\ \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\-1\\0\\i\sqrt{2}\\0\\0\end{pmatrix},\ \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\-1\\0\\-i\sqrt{2}\\0\\0\end{pmatrix}.$$

Учитывая, что при заданной величине квадрата момента импульса $L^2 = l\,(l+1)$ возможные значения проекции L_z равны 0, ± 1, …, $\pm l$, видим, что полученные СЗ отвечают значениям орбитального квантового числа $l = 0$ и $l = 2$.

Искомые состояния осциллятора представляют собой линейные комбинации базисных состояний, коэффициентами в которых служат компоненты полученных собственных векторов матрицы $\widehat{L}_z$. Например:

$$|l = 2,\, m = 2\rangle \;=\; \frac{1}{2}\left(|2\,0\,0\rangle \,-\, |0\,2\,0\rangle \,+\, i\sqrt{2}\,|1\,1\,0\rangle\right).$$

Пользуясь явным выражением для стационарных волновых функций гармонического осциллятора: $|n_x\, n_y\, n_z\rangle \;=\; \psi_{n_x}(x)\,\psi_{n_y}(y)\,\psi_{n_z}(z)$, где $\psi_n(q) = (2^n\, n!\,\sqrt{\pi})^{-1/2}\, H_n(q)\, e^{-q^2/2}$ и H_n – полиномы Эрмита ($H_0(q) = 1$, $H_1(q) = 2\,q$, $H_2(q) = 4\,q^2 \,-\, 2$, $H_{n+1}(q) = 2\,q\,H_n(q) - 2\,n\,H_{n-1}(q)$ и т.д.), легко получим:

$$|l = 2,\, m = 2\rangle \;=\; \frac{(x + i\,y)\, e^{-r^2/2}}{\sqrt{2}\,\pi^{3/4}} \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}\,\pi^{3/4}}\, \sin^2\theta\, e^{2\,i\,\phi}\, r^2\, e^{-r^2/2}.$$

Таким образом, в сферических координатах волновая функция факторизуется на радиальную и угловую, причём последняя представляет собой ничто иное как сферическую гармонику $Y_{l,m}(\theta,\,\phi)$ (например, $Y_{2,\,2} \sim \sin^2\theta\, e^{2\,i\,\phi}$). Это было заранее очевидно, поскольку потенциал изотропного гармонического осциллятора является центральным, и момент импульса является, следовательно, интегралом движения. Такие же в.ф. можно получить, непосредственно решая уравнение Шрёдингера для трёхмерного изотропного осциллятора в сферических координатах.

4.17. Рассчитайте расщепление первого возбуждённого состояния изотропного трёхмерного осциллятора в однородном магнитном поле (эффект Зеемана).

4.18. Вычислите диамагнитную восприимчивость изотропного трёхмерного осциллятора в основном состоянии, $\chi_{\text{lbf}} = -d^2E/dB^2$.

Указание: необходимо вычислить поправку к основному уровню энергии $E_0 = \frac{3}{2}\hbar\,\omega$, квадратичную по напряжённости поля B. Оператор взаимодействия с полем: $V = -\mu_B\,(\mathbf{L}\cdot\mathbf{B}) + \frac{e^2}{8mc^2}\,[\mathbf{B}\times\mathbf{r}]^2$.

4.19. Рассчитайте расщепление первого возбуждённого состояния изотропного трёхмерного осциллятора со спином $1/2$, обусловленное спин-орбитальным взаимодействием. Что можно сказать о величине орбитального и полного момента в этом состоянии ?

Указание: базисные функции имеют вид: $|n_x\, n_y\, n_z;\, \uparrow\rangle$, $|n_x\, n_y\, n_z;\, \downarrow\rangle$, где стрелка обозначает состояние со спином вверх / вниз. Оператор спин-орбитального взаимодействия $\xi\,(\mathbf{L}\cdot\mathbf{S})$ целесообразно представить в виде: $\xi\,\frac{1}{2}(L_+\,S_- \,+\, L_-\,S_+) \,+\, \xi\,L_z\,S_z$. Это удобно, т.к. действие $S_\pm$ на спиновые состояния очень просто. Операторы $L_\pm$ и L_z нужно записать через бозе-операторы a_x^+, a_x, a_y^+ и т.д.

4.20. Определите энергетический спектр и стационарные волновые функции системы с потенциальной энергией:

$$U \,=\, \begin{cases} \frac{m}{2}\omega^2\,x^2, & x \geqslant 0 \\ +\infty, & x < 0 \end{cases}$$

(справа – осциллятор, слева – стенка). Вычислите $\langle x\rangle$ для основного состояния.

5 Спин $^1/_2$. Момент импульса. Сложение моментов.

5.1. Составьте оператор $\widehat{S}_n \,=\, \widehat{\mathbf{S}}\cdot\mathbf{n}$ проекции спина на единичный вектор $\mathbf{n}$, образующий угол θ с осью z. Найдите его собственные значения и вектора.

5.2. Двухуровневая система описывается гамильтонианом вида:

$$\widehat{H} \,=\, H_{11}\,|1\rangle\langle 1| \,+\, H_{22}\,|2\rangle\langle 2| \,+\, H_{12}\,\Big(|1\rangle\langle 2| \,+\, |2\rangle\langle 1|\Big),$$

где H_{11}, H_{22} и H_{12} – вещественные величины (имеющие размерность энергии). Найдите уровни энергии и стационарные состояния.

5.3. Частица заключена в ящик, разделённый на два отсека тонкой перегородкой. Если частица с достоверностью находится в левом или же в правом отсеке, будем обозначать такие состояния соответственно как $|L\rangle$ или $|R\rangle$. В результате туннелирования частица может переходить из одного отсека в другой. Гамильтониан, описывающий этот эффект, имеет вид:

$$\widehat{H} \,=\, \Delta\,\Big(\,|L\rangle\langle R| \,+\, |R\rangle\langle L|\,\Big),$$

где Δ – вещественный параметр, имеющий размерность энергии.

Пусть в момент времени $t_0 = 0$ частица замечена в левом отсеке. Вычислите вероятность обнаружения частицы в правом отсеке при $t > 0$.

5.4. Рассматривается система электронов, находящихся в состоянии с проекцией спина $+\hbar/2$ на ось, лежащей в плоскости xz под углом γ к оси z.

1. Пусть измеряется S_x. Какова вероятность получить результат $\hbar/2$?

2. Вычислите дисперсию S_x: $(\Delta S_x)^2 = \langle(\widehat{S}_x - \langle S_x\rangle)^2\rangle$.

Как ведут себя полученные результаты при $\gamma = 0$, $\pi/2$ и π ?

Указание: воспользуйтесь результатом задачи 5.1.

5.5. Постройте такую суперпозицию спиновых состояний $|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$, для которой произведение неопределённостей $\langle(\Delta S_x)^2\rangle\langle(\Delta S_y)^2\rangle$ становится максимальным.

5.6. Рассмотрите действия операторов: $\exp\left(\frac{i}{\hbar}\,\widehat{S}_x\right)$, $\exp\left(\frac{i}{\hbar}\,\widehat{S}_y\right)$, $\exp\left(\frac{i}{\hbar}\,\widehat{S}_z\right)$ на спиновые состояния $|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$.

5.7. В однородном магнитном поле, параллельном оси z, находится электрон. Измерения показали, что в момент времени $t = 0$ спин электрона был направлен по оси x. Провести квантовомеханический расчёт вероятности того, что электрон в момент $t > 0$ будет в состоянии с: А) $S_x = \frac{1}{2}$; Б) $S_x = -\frac{1}{2}$; В) $S_z = \frac{1}{2}$.

5.8. Пучок электронов, направленный вдоль оси z, последовательно проходит через 3 прибора, реализующих эксперимент Штерна-Герлаха и производящих сортировку электронов по ориентациям спина:

а) первый прибор пропускает электроны с $S_z = \hbar/2$ и отсеивает электроны с $S_z = -\hbar/2$.

б) второй прибор пропускает электроны с $S_n = \hbar/2$ и отсеивает электроны с $S_n = -\hbar/2$, где S_n – собственные значения оператора $\widehat{S}_n$, введённого в задаче 5.1.

в) третий прибор пропускает электроны с $S_z = -\hbar/2$ и отсеивает электроны с $S_z = \hbar/2$.

Какова интенсивность прошедшего электронного пучка с $S_z = -\hbar/2$, если интенсивность пучка с $S_z = \hbar/2$ на выходе из первого прибора принять за единицу ? Как нужно ориентировать второй прибор, чтобы искомая интенсивность была максимальной ?

5.9. Покажите, что в $|l\,m\rangle$-состоянии с определённым $\mathbf{L}^2$ и L_z, средние значения L_x и L_y равны нулю, а $\langle L_x^2\rangle = \langle L_y^2\rangle = \frac{1}{2}\,\hbar^2\Big(l\,(l+1) - m^2\Big)$.

5.10. Пусть $\widehat{\mathbf{j}}_1$ и $\widehat{\mathbf{j}}_2$ – операторы момента импульса двух подсистем. Покажите, что $\widehat{\mathbf{J}} = \widehat{\mathbf{j}}_1 + \widehat{\mathbf{j}}_2$ является оператором момента импульса, но $\widehat{\mathbf{J}}' = \widehat{\mathbf{j}}_1 - \widehat{\mathbf{j}}_2$ *не может рассматриваться*, как оператор момента.

Указание: рассмотрите перестановочные соотношения $[\widehat{\mathbf{J}}_i,\, \widehat{\mathbf{J}}_j]$ и $[\widehat{\mathbf{J}}'_i,\, \widehat{\mathbf{J}}'_j]$.

5.11. Постройте матрицы операторов $\widehat{\mathbf{L}^2}$, $\widehat{L}_z$, $\widehat{L}_\pm$, $\widehat{L}_x$ и $\widehat{L}_y$ на базисе d-состояний.

5.12. Получите явные выражения для сферических гармоник с $l = 2$, находя функцию старшего веса из условия: $\widehat{L}_+ Y_{l,l} = 0$, и последовательно применяя к ней оператор $\widehat{L}_-$.

Решение : Будем исходить из соотношений:

$$\begin{aligned}\widehat{L}_+ Y_{l,l} &= 0,\\ \widehat{L}_- Y_{l,m} &= \sqrt{l\,(l+1) - m\,(m-1)}\, Y_{l,m-1},\end{aligned}$$

где $\widehat{L}_\pm = \widehat{L}_x \pm i\,\widehat{L}_y$. Явный вид этих операторов следующий:

$$\begin{aligned}\widehat{L_x} &= i\left(z\,\frac{\partial}{\partial\, y} - y\,\frac{\partial}{\partial\, z}\right),\\ \widehat{L_y} &= i\left(x\,\frac{\partial}{\partial\, z} - z\,\frac{\partial}{\partial\, x}\right),\\ \widehat{L}_\pm &= \pm z\left(\frac{\partial}{\partial\, x} \pm i\,\frac{\partial}{\partial\, y}\right) \mp (x \pm i\,y)\,\frac{\partial}{\partial\, z}.\end{aligned}$$

Легко видеть, что $\widehat{L}_+\,(x + i\,y)^l = 0$, откуда следует, что функция старшего веса в мультиплете с заданным l имеет вид: $Y_{l,l} = C\,(x + i\,y)^l = C\,e^{i\,l\,\varphi}\,\sin^l\theta$. Константу нормировки находим из условия: $\int |Y_{l,l}|^2\,d\Omega = 1$, откуда $2\,\pi\,C^2 \int\limits_0^\pi \sin^{2\,l+1}\theta\,d\theta = 1$. Переходом к новой переменной $t \equiv \cos\theta$ последний интеграл преобразуется к виду: $\int\limits_{-1}^{1}(1 - t^2)^l\,dt = \int\limits_0^1 (1 - y)^l\,y^{-1/2}\,dy = B(l+1,\,1/2) = \frac{\Gamma(l+1)\,\Gamma(1/2)}{\Gamma(l+1+1/2)} = \frac{2^L\,L!}{(2L+1)!!}$. Здесь были использованы соотношения для бета- и гамма-функции: $B(a,\,b) \equiv \int\limits_0^1 y^{a-1}\,(1 - y)^{b-1}\,dy = \frac{\Gamma(a)\,\Gamma(b)}{\Gamma(a+b)}$, $\Gamma(n+1/2) = 2^{-n}\,(2n-1)!!$ В частности, для $l = 2$ имеем: $C = \sqrt{15/32\,\pi}$. Имея нормированную сферическую гармонику $Y_{2,2}$, находим оставшиеся четыре, действуя оператором $\widehat{L}_-$.

5.13. Допустим, что орбитальное квантовое число могло бы принимать полуцелые значения, например 1/2. Тогда можно было бы ввести сферические гармоники $Y_{1/2,\,\pm 1/2}(\theta,\,\phi)$, которые обладали бы свойствами:

$$\widehat{L}_+ Y_{1/2,\,1/2} \,=\, 0, \;\; \widehat{L}_- Y_{1/2,\,1/2} \,=\, Y_{1/2,\,-1/2}, \;\; \widehat{L}_- Y_{1/2,\,-1/2} \,=\, 0.$$

Покажите, что эти соотношения не могут выполняться одновременно (что доказывает ошибочность исходного допущения об орбитальном числе).

Указание: явные выражения для операторов $\widehat{L}_\pm$ даны в предыдущей задаче.

5.14. Частица находится в $|l, m\rangle$- состоянии с определённым орбитальным числом и проекцией момента импульса на ось z. Вычислите среднее значение и дисперсию проекции её момента импульса на ось z', составляющей с осью z угол γ.

5.15. Волновая функция частицы в центральном поле имеет вид:

$$\psi \,=\, (x \,+\, y \,+\, 3z)\, f(r).$$

1. Является ли ψ собственной функцией оператора $\widehat{\mathbf{L}^2}$? Если да, чему равно орбитальное число l ? Если нет, какие значения l могут быть получены при измерении $\mathbf{L}^2$?

2. Каковы вероятности нахождения частицы в состояниях с различными магнитными числами m ?

5.16. Постройте линейные комбинации сферических гармоник с орбитальным числом $l = 1$, являющиеся собственными функциями операторов $\widehat{L}_x$, $\widehat{L}_y$.

5.17. Атом, находящийся в состоянии с орбитальным числом $l = 2$ и магнитным числом $m = 0$, поворачивается на угол β вокруг оси y. Вычислите вероятности того, что атом окажется в состояниях с $m = 0, \pm 1, \pm 2$.

Указание. Для решения этой задачи понадобятся явные выражения для сферических гармоник, приведённые в таблице на с.8.

5.18. Две частицы с моментом $j_1 \;=\; 1$ и $j_2 \;=\; 1$ могут образовать состояния с полным моментом $j \;=\; 2,\, 1$ и 0. С помощью операторов $\widehat{J}_\pm \;=\; \widehat{J}(1)_\pm + \widehat{J}(2)_\pm$, постройте соответствующие состояния $|j,\, m\rangle$ (все девять), записывая их в виде линейных комбинаций одночастичных состояний $|j_1,\, m_1\rangle\, |j_2,\, m_2\rangle$, например:

$$|j=1,\, m=1\rangle \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}|1,\, 1\rangle_1|1,\, 0\rangle_2 \;-\; \frac{1}{\sqrt{2}}\,|1,\, 0\rangle_1|1,\, 1\rangle_2.$$

Выпишите соответствующие коэффициенты Клебша-Гордана.

5.19. Вычислите коэффициенты Клебша-Гордана $\left[\begin{smallmatrix} 1 & {}^1\!/_2 & {}^1\!/_2 \\ m & m_s & M \end{smallmatrix}\right]$ и $\left[\begin{smallmatrix} 1 & {}^1\!/_2 & {}^3\!/_2 \\ m & m_s & M \end{smallmatrix}\right]$ путём непосредственной диагонализации оператора $\widehat{\mathbf{J}}^2 \;=\; (\widehat{\mathbf{L}} \;+\; \widehat{\mathbf{S}})^2$ на состояниях $|1,\, m\rangle\, |1/2,\, m_s\rangle$.

5.20. Система состоит из частиц со спинами ${}^1\!/_2$. Обменное взаимодействие спинов описывается оператором $J\,(\widehat{\mathbf{S}}_1 \cdot \widehat{\mathbf{S}}_2)$. Магнитные моменты частиц равны $\gamma\,\widehat{\mathbf{S}}_1$ и $-\gamma\,\widehat{\mathbf{S}}_2$, соответственно. К системе приложено однородное постоянное магнитное поле. Найдите энергетический спектр системы.

Указание. Любое состояние системы является суперпозицией четырёх: $|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2$, $|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2$, $|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2$, $|\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2$ (нижними индексами 1, 2 помечены состояния со спином вверх / вниз первой и второй частицы). Чтобы найти уровни энергии, нужно записать матрицу гамильтониана в базисе этих четырёх состояний.

Другой способ решения состоит в том, чтобы выразить гамильтониан через полный спин $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$. Стационарные состояния представляют собой линейные комбинации вышеуказанных базисных, построенные с помощью соответствующих коэффициентов Клебша-Гордана.

6 Приближённые методы.

6.1. Оцените с помощью соотношения неопределённостей энергию основного состояния:

1. одномерного гармонического осциллятора
2. атома водорода
3. атома гелия

6.2. По теории возмущений приближённо определите собственные значения матрицы

$$\begin{pmatrix} 5.1 & 2 & 0.1\,i \\ 2 & 2.1 & 0 \\ -0.1\,i & 0 & 3.1 \end{pmatrix}$$

и сравните полученные результаты с точными. Расчёты можно выполнять с помощью компьютера.

6.3. Частица находится в двумерной потенциальной яме:

$$U = \begin{cases} 0, & 0 \leqslant x \leqslant L,\ 0 \leqslant y \leqslant L \\ \infty & \text{при других } x,\ y \end{cases}$$

Рассчитайте по теории возмущений уровни энергии и волновые функции основного и первого возбуждённого состояния при наличии возмущения:

$$V = \begin{cases} \lambda\, x\, y, & 0 \leqslant x \leqslant L,\ 0 \leqslant y \leqslant L \\ \infty & \text{при других } x,\ y \end{cases}$$

6.4. Одномерный гармонический осциллятор подвергается возмущению вида: $V = \delta x^2$. Получите *точное* выражение для уровней энергии. Сравните его с результатом расчёта по теории возмущений.

Указание: матричные элементы оператора возмущения проще всего вычисляются методом Бозе-операторов (см. формулу 23, стр. 15).

6.5. Заряженный одномерный гармонический осциллятор находится в слабом постоянном однородном электрическом поле. Найдите уровни энергии и стационарные состояния. Решите задачу *точно* и по теории возмущений. Сравните полученные решения.

Решение. Энергия осциллятора в постоянном поле равна: $V = -e\,E\,x$, где e – заряд осциллятора, E – напряжённость поля (колебания происходят вдоль оси x). Полная потенциальная энергия осциллятора есть $U = \frac{1}{2} m\,\omega^2\,x^2 - e\,E\,x$. Выделяя полный квадрат, находим: $U = \frac{1}{2} m\,\omega^2\,q^2 - U_0$, где $q = x - x_0$, $x_0 = \frac{e\,E}{m\omega^2}$, $U_0 = -e\,E\,x_0/2$. Оператор импульса в координатном представлении имеет имеет вид: $\widehat{p} = -i\,\hbar\,\frac{d}{dx} \equiv -i\,\hbar\,\frac{d}{dq}$. Таким образом, путём перехода к "сдвинутой" координате q исходный гамильтониан преобразуется к гамильтониану невозмущённого осциллятора без поля. Точные уровни энергии и волновые функции равны:

$$E_n \,=\, \hbar\,\omega\,\left(n + \frac{1}{2}\right) \,-\, U_0,$$

$$\psi_n(x) \,=\, \phi_n(x - x_0),$$

где $\phi_n(x) \,=\, \ell^{-1/2}\,(2^n\,n!\,\sqrt{\pi})^{-1/2}\,h_n(x/\ell)\,\exp(-x^2/2\,\ell^2)$ – стационарные волновые функции осциллятора, h_n – полиномы Эрмита, $\ell = (\hbar/m\,\omega)^{1/2}$.

Будем теперь рассматривать $\widehat{V}$ как возмущение. Вычисления удобно производить методом Бозе-операторов. Поправка 1-го порядка к невозмущённому уровню энергии равна нулю: $\Delta_1 \varepsilon_n = \langle \phi_n | \widehat{V} | \phi_n \rangle = -e\,E\,\ell/\sqrt{2}\,\langle \phi_n | \widehat{a}^+ + \widehat{a} | \phi_n \rangle = 0$. Для расчёта поправки 2-го порядка запишем сначала недиагональный матричный элемент (элементарно вычисляемый методом Бозе-операторов): $\langle \phi_k | \widehat{a}^+ + \widehat{a} | \phi_n \rangle = \sqrt{n+1}\,\delta_{k,\,n+1} + \sqrt{n}\,\delta_{k,\,n-1}$. Отсюда находим искомую поправку:

$$\Delta_2\,\varepsilon_n = \sum_{\forall\,k \neq n} \frac{|\langle \phi_k | \widehat{V} | \phi_n \rangle|^2}{\varepsilon_n - \varepsilon_k} = \frac{e^2\,E^2\,\ell^2}{2} \left(\frac{n+1}{-\hbar\,\omega} + \frac{n}{\hbar\,\omega} \right) = -U_0.$$

Таким образом, во втором порядке теории возмущений воспроизводится полученное выше точное выражение для уровней энергии: $\varepsilon_n + \Delta_1\,\varepsilon_n + \Delta_2\,\varepsilon_n = \hbar\,\omega\,(n + 1/2) - U_0$.

Поправка 1-го порядка к волновой функции,

$$\Delta_1\,\phi_n = \sum_{\forall\,k \neq n} \frac{\langle \phi_k | \widehat{V} | \phi_n \rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_k}\,\phi_k,$$

вычисляется аналогично. В результате получаем:

$$\phi_n' \simeq \phi_n + \Delta_1\,\phi_n = \phi_n - \frac{e\,E}{\hbar\,\omega} \frac{\ell}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{n}\,\phi_{n-1} - \sqrt{n+1}\,\phi_{n+1}\right).$$

Рассмотрим теперь точное выражение, в котором x_0 будем считать малым параметром:

$$\phi_n(x - x_0) \simeq \phi_n(x) - \left[\frac{d\,\phi_n(x)}{dx} \right] x_0.$$

Чтобы вычислить производную, запишем её через Бозе-операторы, пользуясь формулами (23, 24), стр. 15): $\dfrac{d}{dx} = \frac{1}{\ell\,\sqrt{2}} \Big(\widehat{a} - \widehat{a}^+ \Big)$ (разумеется, такое равенство возможно только когда производная берётся от стационарной волновой функции гармонического осциллятора !). Таким образом, находим:

$$\phi_n(x - x_0) \simeq \phi_n(x) - \frac{1}{\ell\,\sqrt{2}} \Big(\sqrt{n}\,\phi_{n-1}(x) - \sqrt{n+1}\,\phi_{n+1}(x) \Big)\,x_0.$$

Сравнивая с результатом, полученным по теории возмущений и подставляя выражения для x_0, ℓ, констатируем тождественное совпадение обеих формул.

6.6. Двумерный гармонический осциллятор с одинаковыми главными частотами ($\omega_x = \omega_y$) подвергается возмущению вида $V = -\alpha\, x\, y$.

1. Чему равна кратность вырождения уровней энергии при $\alpha = 0$?

2. Получите *точное* выражение для уровней энергии возмущённого осциллятора.

3. Получите приближённые выражения для энергии основного и первого возбуждённого состояния по теории возмущений. Проведите сравнение полученного результата с точным решением.

6.7. Гамильтониан системы имеет вид:

$$\widehat{H} = \frac{1}{2}\left(p_x^2 + p_y^2\right) + \frac{1}{2}(1 + \delta\, x\, y)\left(x^2 + y^2\right).$$

Определите три нижних энергетических уровня и соответствующие волновые функции для $|\delta| \ll 1$.

6.8. Частица совершает одномерное движение в потенциале $U(x)$. Если энергия частицы не велика, то движение должно иметь характер колебаний вблизи его локального минимума, находящегося в точке x_0. Считая амплитуду колебаний малой, потенциал можно разложить в ряд Тейлора и ограничиться небольшим числом членов:

$$U \simeq a_0 + a_2\, q^2 + a_3\, q^3 + a_4\, q^4,$$

где $q = x - x_0$, $a_n = \left(d^n U(x_0)/dx^n\right)/n!$. Первые два члена соответствуют потенциалу гармонического осциллятора, а члены третьей и четвёртой степени можно считать малой поправкой.

Определите частоту малых гармонических колебаний и рассчитайте поправку к спектру гармонического осциллятора с точностью до второго порядка теории возмущений. Полученное приближённое выражение для энергетического спектра представьте в виде:

$$E_n \simeq \hbar\,\omega\left(n + \frac{1}{2} + f(a_3,\, a_4;\, n)\right).$$

6.9. Частица находится в потенциальной яме: $V = V_0\,(a/x - x/a)^2$ ($V_0 > 0$, $a > 0$). По теории возмущений вычислите нижние уровни энергии, используя в качестве нулевого приближения модель гармонического осциллятора, центрированного в точке минимума потенциала. Сравните полученный результат с *точным*: $E_n = \frac{2\hbar}{a}\sqrt{\frac{2V_0}{m}}\left[n + \frac{1}{2} + \frac{1}{4}\left(\sqrt{\frac{8mV_0a^2}{\hbar^2} + 1} - \frac{8mV_0a^2}{\hbar^2}\right)\right]$. Сформулируйте критерий применимости полученных результатов.

6.10. Заряженный трёхмерный гармонический осциллятор с одинаковыми главными частотами ($\omega_x = \omega_y = \omega_z$) помещён в постоянное магнитное поле $\mathbf{B} \parallel z$. Оператор взаимодействия осциллятора с полем имеет вид: $\widehat{V} = -\mu_B\,(\mathbf{B}\cdot\widehat{\mathbf{L}})$, где μ_B – магнетон Бора, $\widehat{\mathbf{L}}$ – оператор момента импульса. Рассчитайте эффект Зеемана для основного и первого возбуждённого состояния.

6.11. Рассчитайте расщепление первого возбуждённого состояния изотропного трёхмерного осциллятора со спином $1/2$, обусловленное спин-орбитальным взаимодействием. Что можно сказать о величине орбитального и полного момента в этом состоянии?

Указание: базисные функции имеют вид: $|n_x\,n_y\,n_z;\,\uparrow\rangle$, $|n_x\,n_y\,n_z;\,\downarrow\rangle$, где стрелка обозначает состояние со спином вверх / вниз. Оператор спин-орбитального взаимодействия $\xi\,(\mathbf{L}\cdot\mathbf{S})$ целесообразно представить в виде: $\xi\,\frac{1}{2}(L_+\,S_- \,+\, L_-\,S_+) \,+\, \xi\,L_z\,S_z$. Это удобно, т.к. действие $S_\pm$ на спиновые состояния очень просто. Операторы $L_\pm$ и L_z нужно записать через бозе-операторы a_x^+, a_x, a_y^+ и т.д.

6.12. Диполь $\mathbf{d}$ с моментом инерции I закреплён одним концом в неподвижной точке и совершает свободное вращение (модель пространственного ротатора) . Определить поляризуемость основного состояния в слабом однородном электрическом поле.

Решение. Гамильтониан в отсутствие поля имеет вид: $\widehat{H}_0 = \dfrac{\widehat{\mathbf{L}^2}}{2I}$. Его собственными функциями являются сферические гармоники, а уровни энергии равны: $\varepsilon_l = \dfrac{\hbar^2\,l(l+1)}{2I}$. Кратность вырождения уровня ε_l равна $2l+1$. Энергия взаимодействия диполя с полем равна $V = -(\mathbf{d}\cdot\mathbf{E})$. Направим ось z системы координат вдоль поля. Тогда $V = -dE\,\cos\theta = -dE\sqrt{4\pi/3}\,Y_{1,0}$. Поправка первого порядка к уровню основного состояния $\Delta_1\varepsilon_0 = \langle Y_{0,0}|V|Y_{0,0}\rangle = 0$, что очевидно, поскольку $Y_{0,0} = 1/\sqrt{4\pi}$. Для расчёта поправки второго порядка понадобится недиагональный матричный элемент оператора возмущения:

$$\langle Y_{l,m}|V|Y_{0,0}\rangle \;=\; -dE\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\,\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\,\langle Y_{l,m}|Y_{1,0}\rangle \;=\; -\frac{dE}{\sqrt{3}}\,\delta_{l,1}\,\delta_{m,0}.$$

Отсюда получаем:

$$\Delta_2\varepsilon_0 = \sum_{l,\,m\neq 0,\,0}\frac{|\langle Y_{l,m}|V|Y_{0,0}\rangle|^2}{\varepsilon_0\,-\,\varepsilon_l} \;=\; -\frac{d^2\,E^2\,I}{3\hbar^2}.$$

В отсутствие поля все ориентации диполя равновероятны и $\langle \mathbf{d} \rangle = 0$. Электрическое поле индуцирует отличный от нуля средний дипольный момент. Очевидно, что он пропорционален приложенному полю: $\langle \mathbf{d} \rangle = \chi\, \mathbf{E}$, где χ называется дипольной восприимчивостью, или поляризуемостью. При нарастании индуцированного дипольного момента от нуля до равновесного значения d, энергия его меняется на величину $-\int\limits_0^d (\mathbf{E} \cdot d\mathbf{P}) = -\chi\, E^2/2$. Сравнивая это с результатом проведённого расчёта, видим, что искомая поляризуемость равна $\chi = \frac{2}{3} d^2 I/\hbar^2$.

6.13. Вычислите поляризуемость атома водорода в основном состоянии и получите для неё оценку: $4a^3 < \chi < (16/3)a^3$, где a – боровский радиус.

6.14. Рассчитайте в первом порядке теории возмущений расщепление уровня атома водорода с главным квантовым числом $n = 2$ в однородном электрическом поле (эффект Штарка).

6.15. Атом водорода находится в слабом однородном постоянном магнитном поле с индукцией $\mathbf{B} \parallel z$. Гамильтониан имеет вид:

$$\widehat{H} = \frac{1}{2m} \left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{e^2}{r},$$

где $(A_x,\, A_y,\, A_z) = \frac{1}{2} B\,(-y,\, x,\, 0)$ – векторный потенциал. Выделите из гамильтониана слагаемые, пропорциональные полю. Трактуя их как возмущение, рассчитайте поправку к уровню энергии основного состояния и диамагнитную восприимчивость атома, $\chi_{\text{диа}} = -\partial^2 E/\partial B^2$.

6.16. В первом порядке теории возмущений рассмотрите влияние неточечности ядра на уровни энергии атома водорода с $n = 1,\, 2$. При этом ядро следует считать равномерно заряженным шариком радиуса $R \ll a_0$.

6.17. Вариационным методом вычислите собственные значения и вектора матрицы $\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 4 \end{pmatrix}$, используя пробный вектор наиболее общего вида: $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b\, e^{i\,\phi} \end{pmatrix}$, где a, b, ϕ – (вещественные) вариационные параметры.

6.18. Вариационным методом вычислите энергию основного состояния двухэлектронного атома. Гамильтониан, отвечающий основному s-состоянию, записывается в виде:

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r_1} \frac{d^2}{dr_1^2} r_1 + \frac{1}{r_2} \frac{d^2}{dr_2^2} r_2 \right) - \left(\frac{Z\, e^2}{r_1} + \frac{Z\, e^2}{r_2} \right) + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}.$$

Здесь первые два члена описывают кинетическую энергию электронов и их кулоновское взаимодействие с ядром, имеющим заряд $Z|e|$. Последнее слагаемое описывает межэлектронное взаимодействие. Если бы оно отсутствовало, то волновая функция основного состояния была бы произведением двух водородоподобных $1s$-функций независимых электронов: $R(Z;\, r_1)\cdot R(Z;\, r_2)$, где $R(Z;\, r) = 2(Z/a_0)^{3/2}\exp(-Z\, r/a_0)$, a_0 – боровский радиус.

Рассмотрите в качестве пробной волновой функции выражение $\psi(r_1,\, r_2) = R(Z';\, r_1)\, R(Z';\, r_2)$, в котором Z' играет роль вариационного параметра.

Указание: При вычислении матричного элемента межэлектронного взаимодействия воспользуйтесь известной формулой:

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{4\pi}{2l+1} \frac{r_<^l}{r_>^{l+1}} Y^*_{l,m}(\theta_1,\, \phi_1)\, Y_{l,m}(\theta_2,\, \phi_2),$$

где $r_< = \min(r_1,\, r_2)$, $r_> = \max(r_1,\, r_2)$. При этом, для s- состояния вклад в матричный элемент даёт только член с $l = 0$.

6.19. Две одинаковых заряженных частицы со спином $1/2$ находятся сильном постоянном магнитном поле напряжённости $\mathbf{B}$. По теории возмущений рассмотрите влияние *обменного взаимодействия* спинов $J\,(\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2)$ на энергетический спектр системы (J – т.н. *обменный интеграл*).

6.20. Гамильтониан двухуровневой системы имеет вид: $H = \left(\begin{smallmatrix} E_1 & \lambda\Delta \\ \lambda\Delta & E_2 \end{smallmatrix}\right)$. Вычислите уровни энергии и стационарные состояния точно и по теории возмущений (λ – малый параметр). Отдельно рассмотрите два случая:

1. $|E_1 - E_2| \gg \lambda\,\Delta$ ("затравочные" уровни невырождены);
2. $|E_1 - E_2| \ll \lambda\,\Delta$ ("затравочные" уровни почти вырождены)

6.21. Частица находится в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме шириной a в основном состоянии. Внезапно пробегает δ-образный импульс $V(x,\, t) = V_0\,\delta(x - c\,t)$. Вычислите по нестационарной теории возмущений вероятности переходов в возбуждённые состояния.

6.22. Вычислите с точностью до второго порядка теории возмущений вероятности переходов одномерного заряженного осциллятора из основного состояния по действием электрического импульса. Напряжённость поля $E(t) = E_0\exp(-t^2/\tau^2)$.