Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Владимирский государственный университет
имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых»
(ВлГУ)
Институт прикладной математики и информатики био- и нанотехнологий
Факультет прикладной математики и информатики
Кафедра физики и прикладной математики

Алоджанц Александр Павлович

Прохоров Алексей Валерьевич

Седов Евгений Сергеевич

Честнов Игорь Юрьевич

Квантовая механика и статистическая физика

Методические указания к практическим занятиям

по дисциплине «Квантовая механика и статистическая физика» для студентов ВлГУ,

обучающихся по направлению 200500 «Лазерная техника и лазерные технологии»

222900.62 «Нанотехнологии и микросистемная техника»

(шифр направления, название)

Владимир-2013г.

Содержание

Общие указания: задачи решаются студентами самостоятельно. Преподаватель дает указания при возникновении затруднений, а также необходимые комментарии, как в процессе решения задачи, так и после его завершения.

ТЕМА 1. КВАНТОВЫЕ СОСТОЯНИЯ. ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ

Задачи:

1. Волновая функция задается на всей вещественной оси выражением

$$\Psi(x) = Ax\exp\left[-\frac{x^2}{2x_0^2}\right],$$

где x_0- константа с размерностью длины. Вычислить нормировочную константу А.

(*Ответ:* $\mathrm{A} = \sqrt{\frac{2}{x_0^3} * \sqrt{\pi}}$.)

2. Волновая функция задается на всей вещественной оси выражением

$$\Psi(x) = A\,[1+\frac{x^2}{x_0^2}]^{-1},$$

где x_0- константа с размерностью длины. Вычислить нормировочную константу А.

(*Ответ:* $\mathrm{A} = \sqrt{2/\pi \mathrm{x}_0}$.)

3. Волновая функция задается на положительной полуоси выражением

$$\Psi(x) = Ax\exp[-\frac{x}{x_0}],$$

где x_0- константа с размерностью длины. Вычислить нормировочную константу А.

(*Ответ:* $\mathrm{A} = 2/\sqrt{x_0^3}$.)

4. Волновые функции задаются на единичной сфере в сферических координатах выражениями

$$\Psi_\pm(\Theta,\varphi) = \mathrm{A}_\pm sin\Theta e^{\pm i\varphi}.$$

Вычислить нормировочные константы $\mathrm{A}_\pm$.

(*Ответ:* $\mathrm{A}_\pm = \sqrt{3/8\pi}$.)

5. Волновая функция задается во всем пространстве в сферических координатах выражением

$$\Psi(r) = A\,exp\left[-\frac{r^2}{2r_0^2}\right],$$

где r_0 - константа с размерностью длины. Вычислить нормировочную константу А.

(*Ответ*: $A = (r_0\sqrt{\pi})^{-3/2}$.)

ТЕМА 2. АЛГЕБРА ОПЕРАТОРОВ

Задачи:

1. Доказать тождества:

$[\hat{F},\hat{G}] = -[\hat{G},\hat{F}]$; $\{\hat{F},\hat{G}\} = \{\hat{G},\hat{F}\}$.

2. Доказать тождества (2.8).

3. Доказать тождество Якоби:

$$\left[\hat{A},[\hat{B},\hat{C}]\right] + \left[\hat{C},[\hat{A},\hat{B}]\right] + \left[\hat{B},[\hat{C},\hat{A}]\right] = \hat{0}.$$

4. Разложить оператор $(\hat{F} - \lambda\hat{G})^{-1}$ по степеням малого параметра λ.

(*Ответ*: $(\hat{F} - \lambda\hat{G})^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty}(\lambda\widehat{F^{-1}}\,\hat{G})^n$.)

5. Доказать тождество Бекера – Кэмпбела – Хаусдорфа:

$$e^{\hat{F}}\hat{G}e^{-\hat{F}} = \hat{G} + [\hat{F},\hat{G}] + \frac{1}{2!}\left[\hat{F},[\hat{F},\hat{G}]\right] + \frac{1}{3!}\left[\hat{F},\left[\hat{F},[\hat{F},\hat{G}]\right]\right] + \cdots$$

6. Для операторов, удовлетворяющих условиям $\left[\hat{F},[\hat{F},\hat{G}]\right] = 0$,

$\left[\hat{G},[\hat{F},\hat{G}]\right] = 0$, доказать тождество Вейля:

$$e^{\hat{F}+\hat{G}} = e^{-\frac{1}{2}[\hat{F},\hat{G}]}e^{\hat{F}}e^{\hat{G}}.$$

ТЕМА 3. СОПРЯЖЕНИЯ ОПЕРАТОРОВ

Задачи:

1. Доказать самосопряженность операторов физических величин из таблицы 2.1.

2. Операторы $\hat{F}$ и $\hat{G}$ эрмитовы. Доказать сопряженность $i[\hat{F},\hat{G}]$ и $\{\hat{F},\hat{G}\}$.

3. Доказать самосопряженность операторов $\hat{A} = \widehat{F^{\dagger}}\hat{F}$ и $\hat{B} = \hat{F}\widehat{F^{\dagger}}$.

4. Доказать, что произвольный оператор можно однозначно представить в виде суммы эрмитова и антиэрмитова операторов.

(*Указание*. Провести аналогию со случаем, когда произвольная функция представляется в виде суммы четной и нечетной функций).

5. Получить аналитический вид оператора 3-мерного сдвига:
$\widehat{T_a}\Psi(r) \overset{def}{=} \Psi(r-a)$.

6. Получить аналитический вид оператора поворота на угол φ_0 вокруг оси, задаваемой единичным вектором **n**.
(*Ответ*: $\widehat{R_n}(\varphi_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\varphi_0 n\hat{L}\right]$.)

7. Показать, что произведение унитарных операторов само является унитарным оператором.

ТЕМА 4. СООТНОШЕНИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ

Задачи:

1. Показать, что функция $\Psi(x) = xe^{-x^2/2}$ является собственной функцией оператора $\hat{F} = \frac{d^2}{dx^2} - x^2$, и найти соответствующее собственное значение.
2. Показать, что функция $\Psi(\theta) = \cos\theta$ является собственной функцией оператора $\hat{F} = -\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d}{d\theta}\right)$, и найти соответствующее собственное значение.
3. Показать, что функция $\Psi(\xi) = \frac{\sin\xi}{\xi}$ является собственной функцией оператора $\hat{F} = \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{2}{\xi}\frac{d}{d\xi}$, и найти соответствующее собственное значение.
4. Показать, что функция $\Psi(p) = e^{-p/3}p^3$ является собственной функцией оператора $\hat{F} = \frac{d^2}{dp^2} + \frac{2}{p} - \frac{6}{p^2}$, и найти соответствующее собственное значение.
5. Найти собственные значение и соответствующие собственные функции антиэрмитова оператора $\frac{\partial}{\partial x}$. В чём заключается принципиальное отличие ответа от случая эрмитова оператора?

ТЕМА 5. СТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ

Задачи:

1. Плоский ротатор с моментом инерции J в момент времени $t = 0$ приведен в состояние с волновой функцией $\Phi(\varphi) = A[1+\cos\varphi+\cos 2\varphi]$. Найти волновую функцию в последующие моменты $t > 0$.

   (Ответ: $\Psi(\varphi,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\left[1+\cos\varphi\exp\left(-\frac{i\hbar t}{2J}\right)+\cos 2\varphi\exp\left(-\frac{2i\hbar t}{J}\right)\right]$.)

2. Могут ли состояния с нижеприведенными волновыми функциями быть стационарными?

   $$\Psi(\xi,t)=\Phi(\xi)e^{-i(\varepsilon-i\gamma)t};\ \Psi(\xi,t)=\Phi(\xi)e^{-i\varepsilon t}-\Phi^*(\xi)e^{i\varepsilon t};$$

   $$\Psi(\varphi,t)=\frac{A}{2}\left(1-\cos 2\varphi e^{2i\hbar t/\alpha}\right);\ \Psi(\xi,t)=\Phi_1(\xi)e^{-i\varepsilon t}+\Phi_2(\xi)e^{-2i\varepsilon t};$$

   $$\Psi(\xi,t)=\Phi(\xi,t)e^{-iEt/\hbar};\ \Psi(\xi,t)=\Phi(\xi,t)e^{b-i\varepsilon t}$$. Все константы предполагать вещественными.

3. Показать, что в волновом пакете

   $$\Psi(x,t>0)=\frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}f(t)}}\exp\left[-\frac{x^2-2ix_0^2k_0x+i\frac{\hbar t}{m}k_0^2x_0^2}{2x_0^2f(t)}\right],\ \text{где}\ f(t)=1+i\frac{\hbar t}{mx_0^2},$$

   уравнение непрерывности выполняется в любой момент времени.

4. Показать, что в стационарных состояниях финитного движения среднее значение импульса равно нулю.

5. Обобщить задачу из доказательства ниже на стационарный случай.

У частицы с массой m *имеются стационарные состояния* $\Psi_i(r)$ *и* $\Psi_f(r)$ *с энергиями* E_i *и* E_f *соответственно. Доказать соотношение:*

$$\left\langle\Psi_f \mid \hat{p} \mid \Psi_i\right\rangle = im\omega_{fi}\left\langle\Psi_f \mid r \mid \Psi_i\right\rangle,$$

где $\omega_{fi} = (E_f - E_i)/\hbar$.

ТЕМА 6. ТЕОРИЯ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

Задачи:

1. Линейный гармонический осциллятор (масса – m, частота – ω) находится в стационарном состоянии. Найти импульсное представление волновой функции.

(*Ответ*: $c_n(p) = \dfrac{1}{\sqrt{2^n n! p_0 \sqrt{\pi}}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}$; $\xi = \dfrac{p}{p_0}$; $p_0^2 = m\hbar\omega$; n = 0, 1,…).

2. Система может находиться лишь в двух состояниях: Ψ_1 и Ψ_2. Матричные элементы оператора $\hat{H}$ известны: $H_{11} = a$; $H_{22} = d$; $H_{12} = b$, $H_{21} = c$. Найти собственные значения энергии.

(*Ответ:* $E_{\pm} = \dfrac{1}{2}\left(a + d \pm \sqrt{(a-d)^2 + 4bc}\right)$).

3. Записать уравнение Шредингера с кулоновским потенциалом $U(r) = \dfrac{\alpha}{r}$ в импульсном представлении.

(*Ответ*: $\left(\dfrac{P^2}{2m} - E\right)\Psi_E(P) + \int \dfrac{4\pi\alpha}{|P' - P|^2} \Psi_E(P') d^3 p' = 0$.)

ТЕМА 7. ТЕОРЕМА ЛИУВИЛЛЯ

Задачи:

1. Проверить теорему Лиувилля для частицы, движущейся: а) по инерции; б) равноускоренно.
2. Проверить теорему Лиувилля для частицы массы m, движущейся в вязкой жидкости с трением, пропорциональным скорости ($F = -\varkappa \dot{q}$).
3. Проверить теорему Лиувилля для частиц в постоянном поле тяжести, для которых в начальный момент времени фазовые точки составляли треугольник с вершинами $A(z_0, p_0)$, $B(z_0 + a, p_0)$, $C(z_0 + b)$.

ТЕМА 8. ВОДОРОДОПОДОБНЫЙ АТОМ

Задачи:

1. Найти $\langle\cos\theta\rangle$ и $\langle\cos^2\theta\rangle$ в $s-$состоянии пространственного ротатора. (*Ответ:* 0, $\frac{1}{3}$.)

2. Найти $\langle\cos^2\theta\rangle$ в $p-$состоянии пространственного ротатора с $m = 0, \pm 1$. (Ответ: $\frac{3}{5}, \frac{1}{5}$.)

3. Показать ортогональность водородных функций ψ_{200} и ψ_{210}, ψ_{100} и ψ_{210}. Убедиться в неортогональности $f_{20}(r)$ и $f_{21}(r)$, $f_{10}(r)$ и $f_{21}(r)$. Объяснить причину.

4. Найти среднее значение r^n в $1s-$состоянии водородоподобного атома $(n > -2)$. (*Ответ:* $\frac{(n+2)!}{2^{n+1}}(\frac{a_0}{Z})^n$.)

5. Найти среднее значение r^n в $2s-$состоянии водородоподобного атома $(n > -2)$. (*Ответ:* $\frac{1}{8}(\frac{a_0}{Z})^n(n^2+3n+4)(n+2)!$)

6. Найти среднее значение r^n в $2p-$состоянии водородоподобного атома $(n > -4)$. (*Ответ:* $\frac{1}{24}(\frac{a_0}{Z})^n(n+4)!$)

7. Найти средние значения $\hat{p}^2$ и r^{-1} в произвольном стационарном состоянии водородоподобного атома с главным квантовым числом n. (*Ответ:* $\langle\hat{p}^2\rangle = \mu\frac{Z^2}{n^2}\frac{e^2}{a_0}; \langle r^{-1}\rangle = \frac{Z}{n^2 a_0}$.)

8. Электрон в водородоподобном атоме с зарядом Z занимает уровень с главным квантовым числом $n = 2$. Как известно, данный уровень 4-кратно

вырожден. Будем нумеровать волновые функции, соответствующие $n=2.$, следующим образом:

$$\psi_{200}(r)\equiv\psi_1(r);\ \psi_{210}(r)\equiv\psi_2(r);\ \psi_{211}(r)\equiv\psi_3(r);\ \psi_{21-1}(r)\equiv\psi_4(r).$$

Вычислить интегралы $F_{ij}=\int\psi_i^*(r)z\psi_j(r)d^3r$ ($z-$декартова координата).

(*Ответ:* $F_{12}=F_{21}=-3\dfrac{a_0}{Z}$; в остальных случаях $F_{ij}=0$).

9*. Найти дискретный спектр для электрона в поле $U(r)=-\dfrac{Ze^2}{r}+\dfrac{a}{r^2}$. (*Ответ:* $E_{nl}=-\dfrac{1}{2}\dfrac{Z^2}{(n-\mu_l)^2}\dfrac{e^2}{a_0}$, где $\mu_l=\dfrac{\alpha\mu}{\hbar^2(l+\frac{1}{2})}$.)

10*. Найти средний потенциал электростатического поля, создаваемого водородоподобным ионом в $1s-$состоянии, как функцию расстояния до точечного ядра с зарядом Z. В чем состоит принципиальное отличие случая $Z=1$от $Z>1$? (*Ответ:*

$$\varphi(r)=\frac{Ze}{r}-\frac{e}{r}\left\{1-\left[\frac{2Z^2}{a_0^2}r^2+\frac{2Z}{a_0}r+1\right]\exp\left(-\frac{2Zr}{a_0}\right)\right\}-\frac{Ze}{a_0}\left(\frac{2Ze}{a_0}+1\right)\exp\left(-\frac{2Zr}{a_0}\right).$$

При $Z=1$ потенциал $\varphi(r)$ становится короткодействующим.)

11*. Определить уровни энергии для движения частицы массы μ с моментом $l=0$ и сферической потенциальной яме конечной глубины:

$$U(r)=\begin{cases}-U_0, r\le a;\\ 0, r>a.\end{cases}$$

При какой минимальной глубине в яме присутствует лишь один уровень?

Тема 9. ***Задачи***:

1. Найти уровни энергии и собственные функции $\psi_{n_rlm}(r,\theta,\varphi)$ оператора Гамильтона сферического осциллятора из решения уравнения Шредингера в сферических координатах. Произвести классификацию состояний осциллятора, относящихся к $N-$му энергетическому уровню, по квантовым числам n_r, l и честности. Какова кратность вырождения уровней?

2. Показать, что для пространственного осциллятора операторы

$$\hat{T}_{ik} = \hat{p}_i \hat{p}_k / \mu + k\hat{x}_i \hat{x}_k$$

Коммутируют с гамильтонианом $\hat{H} = \hat{p}^2 / 2\mu + kr^2 / 2$.

3. Найти уровни энергии $E_{n_r t}$ и волновые функции $\psi_{n_r lm}$ стационарных состояний частица a бесконечно глубокой сферической яме

$$U(r) = \begin{cases} 0, r \le a; \\ \infty, r > a. \end{cases}$$

4. Найти энергетические уровни частицы в поле

$$U(r) = -\alpha\delta(r - a).$$

Каково условие существования состояний дискретного спектра с моментом l?

5. Для частицы со спином $s = 1/2$ найти из решения задачи на собственные функции и собственные значения спиновые функции $\psi_{s_t}(l = 1,2,3)$, описывающие состояния частицы с определенной проекцией спина на оси x, y, z системы координат.

6. Произвольный линейный оператор $\hat{L}$, действующий в пространстве спиновых переменных частицы с $s = 1/2$, является квадратной матрицей 2-го ранга. Какие ограничения накладывает эрмитовость оператора $\hat{L}$ на элементы этой матрицы? Найти собственные значения такого эрмитова оператора.

7. Убедиться в полноте системы из четырех двухрядных матриц $\hat{l}, \hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$. Показать, что коэффициенты в разложении произвольной квадратной матрицы 2-го ранга $\hat{A}$ по этим матрицам

$$\hat{A} = a_0 \hat{l} + a_x \hat{\sigma}_x + a_y \hat{\sigma}_y + a_z \hat{\sigma}_z \equiv a_0 + a\hat{\sigma}$$

могут быть вычислены по формулам

$$a_0 = \frac{1}{2} Sp\hat{A}, \qquad a = \frac{1}{2} Sp(\hat{\sigma}\hat{A}).$$

8. Указать возможный вид операторов проекций электронного спина $\hat{s}_x, \hat{s}_r, \hat{s}_z$ в $s_x -$ представлении. Найти вид унитарного оператора O, осуществляющего переход от $s_z -$ к $s_x -$ представлению.

9. Показать, что для состояния, описываемого спиновой волновой функцией

$$\psi = e^{i\gamma}\begin{pmatrix} \cos\alpha \\ \sin\alpha e^{i\beta} \end{pmatrix}$$

(это есть наиболее общий вид нормированной волновой функции спинового состояния частицы со спином $s = 1/2; \quad 0 \le \alpha \le \pi/2,\ 0 \le \beta \le 2\pi$), можно указать такую ось в пространстве, проекция спина на которую имеет определенное значение +1/2. Найти полярный и азимутальный углы этой оси.