

# ЗАДАНИЕ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ I

Авторы заметок: Хоружий Кирилл  
Примаков Евгений  
Гурьева Соня

От: 16 сентября 2021 г.

## Содержание

1 Упражнения	1
2 Задачи	1
T1	1
T2	2
T3	3
T5	5
T7	7
T8	8
T9	10

## 1 Упражнения

### У1

В общем и целом нужно найти  $A^*$  и  $A^{-1}$  для заданного  $A$ .

**а) Оператор инверсии.** И так, что же такое оператор инверсии, а это  $I\psi(x) = \psi(-x)$ . Обратный оператор должен по определению

$$I^{-1}I\psi(x) = \psi(x) \xRightarrow{x \mapsto -x} I^{-1}\psi(x) = \psi(-x) \Rightarrow I^{-1} = I.$$

По определению сопряженного оператора  $(\langle \Phi | I \Psi \rangle)^* = \langle \Psi | I^* \Phi \rangle$ <sup>1</sup>. Напомним  $[I\Psi](x) = \Psi(-x)$ , что означает уже для состояний  $\langle x | I \Psi \rangle = \langle -x | \Psi \rangle$ , с этим знанием

$$\langle \Phi | I \Psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \langle \Phi | x \rangle \langle x | I \Psi \rangle dx = \int_{\mathbb{R}} \langle \Phi | x \rangle \langle -x | \Psi \rangle dx = \int_{\mathbb{R}} \langle \Phi | -x \rangle \langle x | \Psi \rangle dx = \langle \Phi | \Psi \rangle = \langle \Phi | I^* \Psi \rangle \Rightarrow I^* = I.$$

То есть получили, что оператор инверсии унитарен  $II^* = \mathbb{E}$  (единичный оператор).

**б) Оператор трансляции.** Оператор трансляции работает  $\hat{T}_a |x\rangle = |x+a\rangle$  или так  $\langle x | T_a \Psi \rangle = \Psi(x+a)$ .

Вполне тривиально, что обратный к оператору трансляции это просто  $T_{-a}$ . Сопряженный же пойдём искать по той же схеме

$$\langle \Phi | T_a \Psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \langle \Phi | x \rangle \langle x+a | \Psi \rangle dx = \int_{\mathbb{R}} \langle \Phi | x-a \rangle \langle x | \Psi \rangle dx = \langle T_a^* \Phi | \Psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \langle T_a^* \Phi | x \rangle \langle x | \Psi \rangle dx.$$

Где предпоследнее равенство взято просто по определению сопряженного оператора, а последнее неравенство просто по представлению средней величины, тогда видим, что получается следующее

$$\langle x | T_a^* \Phi \rangle = \Phi(x-a) \Rightarrow T_a^* = T_{-a} = T_a^{-1}.$$

Мы вновь получили, что  $T_a^* T_a = \mathbb{E}$  — унитарный оператор.

## 2 Задачи

### T1

**Собственные функции.** Рассмотрим частицу в очень глубокой потенциальной одномерной яме:

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x \notin [0, a]; \\ 0, & x \in [0, a]; \end{cases} \quad H(x, -i\hbar\partial_x)\psi(x) = E\psi(x), \quad \Rightarrow \quad \psi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0.$$

<sup>1</sup> тут можно стать свидетелем замены строчной пси на заглавную

Тогда решение может быть найдено в виде

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx), \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E,$$

но в силу требования  $\psi(x)|_{x \in \{0, a\}} = 0$ , сразу получаем  $B = 0$ , и условие на  $k$ :

$$k = k_n = \frac{\pi n}{a}, \quad \Rightarrow \quad E_n = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \pi^2 n^2,$$

то есть спектр дискретный.

Из нормировки  $\psi$  можем найти

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int_0^a dx |\psi(x)|^2 = \frac{|A|^2}{2} a = 1, \quad \Rightarrow \quad A = \sqrt{\frac{2}{a}}.$$

Тогда искомая волновая функция стационарных состояний и соответствующие уровни энергии

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi n}{a} x\right), \quad E_n = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \pi^2 n^2.$$

**Средние значения.** Найдём среднее значение для координаты

$$\langle x \rangle = \int_0^a x |\psi_n(x)|^2 dx = \frac{2}{a} \int_0^a x \sin^2(k_n x) dx = \frac{2}{a} \left( \frac{a^2}{4} - \frac{1}{4k_n} \frac{1}{2k_n} \cos(2k_n x) \Big|_0^a \right) = \frac{a}{2}.$$

Аналогично можем найти среднее значение импульса

$$\langle p \rangle = \int_0^a dx \psi^* \hat{p} \psi = -i\hbar k_n \frac{2}{a} \int_0^a \sin(k_n x) \cos(k_n x) dx = -\frac{i\hbar k_n}{a} \int_0^a \sin(2k_n x) dx = 0,$$

в силу интегрирования по периоду.

Теперь можем посчитать дисперсию величин

$$(\Delta x)^2 = \langle \psi | (\hat{x} - \bar{x})^2 | \psi \rangle = \langle \psi | x^2 | \psi \rangle - \bar{x}^2,$$

и аналогично с  $\hat{p}$ . Для координаты среднее квадрата

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2}{a} \int_0^a x^2 \sin^2(k_n x) dx = \frac{a^2}{3} + \frac{1}{ak_n} \int_0^a \sin(2k_n x) x dx = \frac{a^2}{3} - \frac{1}{2ak_n^2} x \cos(2k_n x) \Big|_0^a = \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2\pi^2 n^2},$$

а соответствующая дисперсия

$$(\delta x)^2 = a^2 \left( \frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2 n^2} \right).$$

Теперь для импульса

$$(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle = \int_0^a dx \psi^* (-\hbar^2 \partial_x^2) \psi = \frac{2k_n^2 \hbar^2}{2a} \int_0^a dx (1 = \cos(2k_n x)) = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{a^2}.$$

**Сравним с классикой.** Понятно, что частица равновероятно может находиться в любой части ящика (в классическом случае), тогда

$$\int_0^a P(x) dx = 1, \quad \Rightarrow \quad P(x) = \frac{1}{a}, \quad \Rightarrow \quad \langle x \rangle^{\text{кл}} = \int_0^a P(x) x dx = \frac{a}{2} = \langle x \rangle.$$

Теперь для импульса,  $p \in \{-p_0, p_0\}$ , где  $P(p_0) = P(-p_0) = 1/2$ , тогда

$$\langle p \rangle^{\text{кл}} = P(p_0)p_0 + P(-p_0)(-p_0) = 0 = \langle p \rangle.$$

Аналогично с квадратом координаты

$$\langle x^2 \rangle^{\text{кл}} = \int_0^a \frac{1}{a} x^2 dx = \frac{a^2}{3} = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle x^2 \rangle,$$

что прекрасно сходится с принципом соответствия.

## T2

**а) Неглубокая симметричная яма.** Задан потенциал, с учетом которого мы получаем оператор Гамильтона для нашей задачи:

$$U(x) = \begin{cases} -U_0, & |x| \leq a \\ 0, & |x| \geq a \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \hat{H} = \begin{cases} \frac{p^2}{2m} - U_0, & |x| \leq a \\ \frac{p^2}{2m}, & |x| \geq a \end{cases}$$

Тогда решаем уравнение Шредингера  $\hat{H}\psi = E\psi$  вне и снаружи ямы, помня что  $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \psi + (\hat{U} - E) = 0 \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 + E) \psi = 0 \\ \psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0 \end{cases}$$

Посмотрим теперь на движение частицы в неглубокой потенциальной яме

$$U(x) = \{-U_0, |x| < a; \quad 0, |x| \geq a. \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U}(x).$$

Так как речь идёт про связанные состояния, то будем считать  $E < 0$ , тогда, для удобства, переобозначим  $E \rightarrow -E$ . Запишем стационарное уравнение Шредингера, сразу раскрывая  $U(r)$ , выделяем две области:

$$\begin{cases} \psi'' + k^2\psi = 0, & |x| < a; \\ \psi'' - \kappa^2\psi = 0, & |x| > a; \end{cases} \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E), \quad \kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E,$$

В силу симметричности потенциала ( $[\hat{I}, \hat{H}] = 0$ ), решения могут быть найдены, как собственные функции оператора инверсии, то есть в виде четных и нечетных функций. Тогда сразу можем выделить два решения:

$$\psi^+(x) = \begin{cases} A \cos(kx), & |x| < a; \\ B e^{-\kappa|x|}, & |x| > a; \end{cases} \quad \psi^-(x) = \begin{cases} A \sin(kx), & |x| < a; \\ B \operatorname{sign}(x) e^{-\kappa|x|}, & |x| > a; \end{cases}$$

где сразу воспользовались  $L_2$  интегрируемостью  $\psi$  и выбросили решение вида  $e^{\kappa x}$ .

Осталось воспользоваться гладкостью  $\psi(x)$ , удобнее будет проверить непрерывность логарифмической производной

$$(\ln \psi)' = \frac{\psi'}{\psi}, \quad \Rightarrow \quad \frac{\psi'(a - \varepsilon)}{\psi(a - \varepsilon)} = \frac{\psi'(a + \varepsilon)}{\psi(a + \varepsilon)}, \quad \Rightarrow \quad \kappa = k \tan(ka), \quad \Leftrightarrow \quad |\cos(ka)| = \frac{ka}{k_0 a},$$

где ввели  $k_0^2 = \kappa^2 + k^2$ . Получили трансцендентное уравнение на уровни энергии, анализ которого удобнее всего произвести графически (рис. 1). Ясно, что спектр не просто дискретен, но и ограничен. Четное состояние существует при  $k_0 a > 0$ ,  $N$  четных существует при  $k_0 a \geq (N - 1)\pi$ . Важно, что решения существуют только при  $\operatorname{tg} ka > 0$ .

Аналогично, через логарифмическую производную находим условие на уровни энергии нечетных решений.

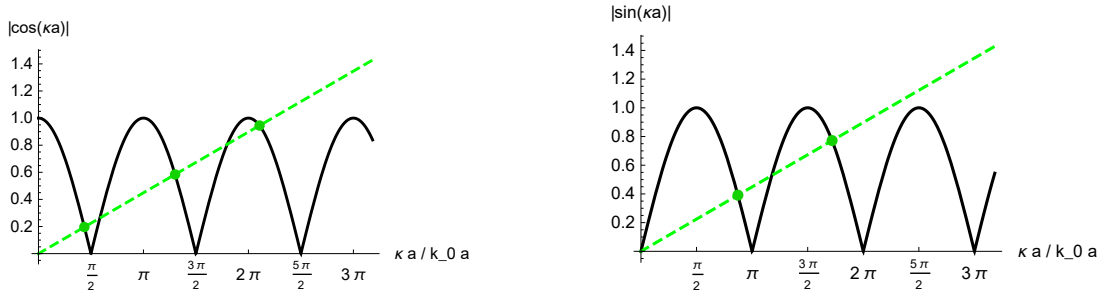


Рис. 1: Трансцендентное уравнение (для четного и нечетного решения) на уровни энергии к задаче T2

### T3

а) Задан потенциал  $U(x) = -\frac{\hbar^2}{m}\kappa_0\delta(x)$ , который представляет собой дельта-яму. Прежде чем как всегда решать стационарное уравнение шредингера сделаем замечание, что  $E < 0$ , тогда получим

$$\hat{H}\psi = -|E|\psi, \quad \kappa^2 := \frac{2m|E|}{\hbar}.$$

С такой заменой получим вполне красивый диффур второго порядка:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' - \frac{\hbar^2}{m}\kappa_0\delta(x)\psi + |E|\psi = 0 \quad \Rightarrow \quad \psi'' - (\kappa - 2\kappa_0\delta(x))\psi = 0.$$

Мы ожидаем непрерывности от волной функции на границах областей, а именно в точке дельта-ямы, то есть одним из граничных условий будет  $\psi(-0) = \psi(+0)$ .

Потребовав непрерывности  $\psi$ , из-за дельта функции, мы получаем разрыв для первой производной

$$\psi'' - (\kappa - 2\kappa_0\delta(x))\psi = 0 \quad \xRightarrow{\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}} \quad \psi'(+0) - \psi'(-0) = -2\kappa_0\psi(0).$$

Вне ямы будем наблюдать спад по экспоненте, сама же яма – по сути точечна, значит такое же поведение будем ожидать и в связанном состоянии, таким образом ищем волновую функцию как

$$\psi = \begin{cases} C_1 e^{-\kappa x}, & x > 0 \\ C_2 e^{\kappa x}, & x < 0 \end{cases}$$

Из непрерывности получим автоматически, что

$$\psi(-0) = \psi(+0) \Rightarrow C_2 = C_1 = C.$$

Разрыв же первой производной позволит нам найти

$$\psi'(+0) - \psi'(-0) = -2\kappa_0\psi(0) \Rightarrow -2\kappa_0 C = C(-\kappa - \kappa) \Rightarrow \kappa = \kappa_0.$$

Таким образом энергия связанного состояния:

$$E = -\frac{\hbar^2 \kappa_0^2}{2m}$$

Теперь, осталось проверить нормировку нашей волновой функции

$$\int_{\mathbb{R}} \psi \psi^* dx = 1 \Rightarrow C^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\kappa_0|x|} dx = \frac{C^2}{\kappa_0} \int_0^{+\infty} e^{-2\kappa_0 x} d2\kappa_0 x = \frac{C^2}{\kappa_0} = 1 \Rightarrow \kappa_0 = C^2.$$

Таким образом собирая всё вместе получаем волновую функцию вида:

$$\psi(x) = \sqrt{\kappa_0} e^{-\kappa_0|x|}$$

Мы получили волновую функцию в координатном представлении для уровня энергии ноль  $\psi(x) = \langle x|0 \rangle$ .

Тогда в импульсном представлении

$$\psi(p) = \langle p|0 \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx \langle p|x \rangle \langle x|0 \rangle = \int_{\mathbb{R}} \langle p|x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar} p x} = \frac{\sqrt{\kappa_0}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} e^{-\kappa_0 x - \frac{i}{\hbar} p x} dx = \frac{\sqrt{\kappa_0}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \cdot \frac{2\kappa_0}{\kappa_0^2 + (p/\hbar)^2} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{(\kappa_0 \hbar)^{3/2}}{(\kappa_0 \hbar)^2 + p^2}.$$

Дальше будет менее широко, честно, а ведь это ещё опущено наше любимое интегрирование по частям.

$$\langle 0|\hat{p}|0 \rangle = 0, \quad \langle 0|\hat{x}|0 \rangle = 0.$$

По тому же определению теперь будем получать нечто сложнее чем ноль

$$\langle 0|\hat{x}^2|0 \rangle = \int_{\mathbb{R}} \kappa e^{-2\kappa_0|x|} \hat{x}^2 dx = \underbrace{2\kappa_0}_{\alpha} \int_0^{+\infty} e^{-2\kappa_0 x} x^2 dx = \alpha \frac{d^2}{d\alpha^2} \int_0^{+\infty} e^{-\alpha x} dx = \frac{2}{\alpha^2} = \frac{1}{2\kappa_0^2}.$$

Красиво продифференцировали под знаком интеграла и получили ответ, осталось ещё немного, не зря же мы  $\psi(p)$  считали, стоит, кстати, обратить внимание, что теперь именно по  $\alpha^2$  дифференцируем:

$$\langle 0|\hat{p}^2|0 \rangle = \int_{\mathbb{R}} dp p^2 \frac{2}{\pi} \frac{(\kappa_0 \hbar)^3}{((\hbar \kappa_0)^2 + p^2)^2} = \frac{2}{\pi} (\kappa_0 \hbar)^3 \left(-\frac{d}{d\alpha^2}\right) \int_{\mathbb{R}} \frac{p^2}{\alpha^2 p^2} dp = \frac{2}{\pi} (\kappa_0 \hbar)^3 \left(-\frac{d}{d\alpha^2}\right) \frac{2\pi i(i\alpha)^2}{2i\alpha} \Big|_{\alpha=\kappa_0 \hbar} = (\kappa_0 \hbar)^2.$$

Из-за того, что средние от координаты и импульса нулевые – дисперсии совпадают с средними квадратами.

Для интереса теперь ещё посмотрим на соотношение неопределенности

$$\langle (\Delta \hat{x})^2 \rangle \langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle = \frac{1}{2\kappa_0^2} \kappa_0^2 \hbar^2 = \frac{\hbar^2}{2},$$

что больше абсолютного минимума для когерентного состояния осциллятора  $= \hbar^2/4$ .

**б)** И казалось бы всё хорошо, всё изучили в связанном состоянии, но теперь в той же задаче мы будем смотреть на области непрерывного спектра и решать задачу о рассеянии волны на потенциале.

Запишем тогда наиболее общую волновую функцию, в которой на нижней строчки стоят (условно) волны распространяющиеся левее ямы, а точнее подошедшая из  $-\infty$  с амплитудой  $C$ , и ушедшая в  $-\infty$  с амплитудой  $D$ . Аналогично правее потенциала будет ушедшая в  $+\infty$  с амплитудой  $A$  и пришедшая из  $+\infty$  с амплитудой  $B$ .

$$\psi = \begin{cases} Ae^{i\kappa x} + Be^{-i\kappa x}, & x > 0 \\ Ce^{i\kappa x} + De^{-i\kappa x}, & x < 0 \end{cases} \Rightarrow \psi = \begin{cases} Ae^{i\kappa x}, & x > 0 \\ Ce^{i\kappa x} + De^{-i\kappa x}, & x < 0 \end{cases}$$

Мы сразу выберем, что волна падала слева, значит  $B = 0$ , и пусть она это делала с  $C = 1$ , так как в вопросах рассеивания нас будут интересовать относительные величины.

Тем не менее у нас всё так же должно быть непрерывно для волновой функции и скачкообразно для её производной в нуле:

$$\begin{aligned} A + B &= C + D \\ i\kappa(A - B) - i\kappa(C - D) &= -2\kappa_0\psi(0) \end{aligned} \Rightarrow i\kappa[(C - D) - (A - B)] = 2\kappa_0(A + B)$$

Теперь подставим наши допущения ( $B = 0$ ,  $C = 0$ ) и выразим капшу

$$\kappa = 2i\kappa_0 \frac{A + B}{(A - B) - (C - D)} = 2i\kappa_0 \frac{A}{A - (1 - D)} = i\kappa_0 \frac{A}{A - 1}.$$

Тут последнее равенство последовало из непрерывности в нуле:  $A + 0 = 1 + D$ . И чтобы научиться сравнивать амплитуды возьмём и выразим их все через  $\kappa$  и  $\kappa_0$ , что мы уже можем сделать:

$$A = \frac{\kappa}{\kappa - i\kappa_0}, \quad D = \frac{i\kappa_0}{\kappa - i\kappa_0}.$$

Теперь введем такое понятие как плотность потока вероятности, что, если грубо обобщать, является отголоском уравнения непрерывности из какой-нибудь механики сплошной среды или теории поля. И так по определению

$$j(x) = -\frac{i\hbar}{2m}(\psi'\psi^* - \psi\psi'^*).$$

А так же коэффициенты прохождения и отражения соответственно

$$T_u = \left| \frac{j_{\text{out}}}{j_{\text{in}}} \right|, \quad R_u = \left| \frac{j_{\text{back}}}{j_{\text{in}}} \right|.$$

Где подписи *in*, *out*, *back* соответствуют пришедшей, прошедшей, отразившейся волне, а в нашем случае коэффициентам потокам вероятности от волновой функции с коэффициентами  $C$ ,  $A$ ,  $D$  соответственно.

$$\begin{aligned} j_{\text{in}} = j[e^{i\kappa x}] &= -\frac{i\hbar}{2m}(i\kappa + i\kappa) = \frac{\hbar\kappa}{m} \\ j_{\text{out}} = j[Ae^{i\kappa x}] &= -\frac{i\hbar}{2m}|A|^2(i\kappa + i\kappa) = \frac{\hbar\kappa}{m \left( \left( \frac{\kappa}{\kappa_0} \right)^2 + 1 \right)} \\ j_{\text{back}} = j[De^{-i\kappa x}] &= -\frac{i\hbar}{2m}|D|^2(-i\kappa - i\kappa) = -\frac{\hbar\kappa}{m \left( \left( \frac{\kappa}{\kappa_0} \right)^2 + 1 \right)} \end{aligned}$$

И тогда

$$\boxed{T = \left| \frac{j_{\text{out}}}{j_{\text{in}}} \right| = \frac{\kappa^2}{\kappa^2 + \kappa_0^2}} \quad \boxed{R = \left| \frac{j_{\text{back}}}{j_{\text{in}}} \right| = \frac{\kappa_0^2}{\kappa^2 + \kappa_0^2}}.$$

в) Честно, трудно понять, что автор задания имеет в виду под вероятностью "ионизации". Самое правдоподобное, что нам удалось придумать — вылет электрона из ямы при таком её резком изменении, что по аналогии с отрыванием электрона от атома её ионизует. Однако посчитать что-то близкое по ответу к Белоусову так и не вышло, а потому по определению вероятность "ионизации":

$$W = 1 - \frac{4\kappa_0\kappa_1}{(\kappa_0 + \kappa_1)^2} = \left( \frac{\kappa_0 - \kappa_1}{\kappa_0 + \kappa_1} \right)^2.$$

## T5

I. Найдём уровни энергии и волновые функции связанных состояний ( $E < 0$ ) частицы в поле

$$U(x) = -\frac{\hbar^2\kappa_0}{m} \left( \delta(x+a) + \delta(x-a) \right).$$

Гамильтониан системы и стационарное уравнение Шрёдингера:

$$H = -\frac{\hbar^2\partial_x^2}{2m} + U(x), \quad -\frac{\hbar^2\partial_x^2}{2m}\psi(x) + U(x)\psi(x) = -|E|\psi(x),$$

далее считая  $E = -E$ , будем решать уравнение

$$\psi''(x) - \frac{2m}{\hbar^2}(U(x) + E)\psi(x) = 0.$$

В местах, где не происходит скачков производной подходит в качестве решения экспонента, так что будем искать решение в виде

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa(x+a)}, & x < -a \\ Be^{-\kappa(x+a)} + Ce^{\kappa(x-a)}, & |x| < a \\ De^{-\kappa(x-a)}, & x > a. \end{cases}$$

где введено  $\kappa^2 = 2mE/\hbar^2$ .

Можно было бы заметить, что потенциал симметричен, а значит можно искать решение уравнения Шрёдингера, как собственные функции оператора инверсии: четные и нечетные решения ( $A = D$ ,  $B = C$  и  $A =$

$-D, B = -C$ ), но мы пойдём другим путём, чтобы посмотреть, как из уравнений вылезет симметрия задачи.

Чтобы найти  $\psi(x)$  запишем условия непрерывности и, интегрируя стационарное уравнение Шредингера, уравнение на скачок производной:

$$\left. \begin{aligned} \psi(-a+\varepsilon) &= \psi(-a-\varepsilon), \\ \psi(a+\varepsilon) &= \psi(a-\varepsilon), \\ \psi'(-a+\varepsilon) - \psi'(-a-\varepsilon) &= -2\kappa_0\psi(-a), \\ \psi'(a+\varepsilon) - \psi'(a-\varepsilon) &= -2\kappa_0\psi(a) \end{aligned} \right\} \Rightarrow \left. \begin{aligned} A - C - Be^{2a\kappa} &= 0 \\ B - D + Ce^{2a\kappa} &= 0 \\ -A + C - Be^{2a\kappa} + 2A\kappa_0/\kappa &= 0 \\ B - D - Ce^{2a\kappa} + 2D\kappa_0/\kappa &= 0 \end{aligned} \right\}$$

Для удобства введем  $X = e^{2a\kappa}$ , и выразив из первого уравнения  $A$ , из второго  $B$ , из третьего  $C$  подставим и получим уравнение вида

$$\frac{D\kappa(\kappa - \kappa_0)}{(\kappa - \kappa_0) + \kappa_0 X^{-2}} = d\kappa_0, \quad \Rightarrow \quad \kappa^2 - 2\kappa\kappa_0 + \kappa_0^2 - \frac{\kappa_0^2}{X^2} = 0, \quad \Rightarrow \quad \boxed{\kappa_{\pm} = (1 \pm e^{-2A\kappa})\kappa_0}, \quad (1)$$

что составляет условие совместности полученной СЛУ,

Забавный факт: составим матричку для СЛУ и найдём определитель

$$M = \begin{pmatrix} 1 & -X & -1 & 0 \\ 0 & 1 & X & -1 \\ \kappa - 2\kappa_0 & \kappa X & -\kappa & 0 \\ 0 & \kappa & -\kappa X & 2\kappa_0 - \kappa \end{pmatrix}, \quad \det M = 4(X^2(\kappa - \kappa_0)^2 - \kappa_0^2).$$

Решение уравнения  $\det M = 0$  относительно  $\kappa$  приводит к тем же корням, что и уравнение (1):  $\kappa = (1 \pm e^{-2A\kappa})\kappa_0$ , таким образом СЛУ будет совместна, если вырождена.

Стоит заметить, что  $\text{rg } M(\kappa_{\pm}) = 3$ , тогда, решая уравнение относительно  $A, B, C$ , находим

$$\begin{aligned} \kappa_+ : \quad A = D, \quad B = C &= \frac{A}{1 + e^{2a\kappa}}, & \text{четное решение} \\ \kappa_- : \quad A = -D, \quad B = -C &= -\frac{A}{-1 + e^{2a\kappa}}, & \text{нечетное решение} \end{aligned}$$

Для наглядности можем их построить<sup>2</sup>. **Нормировка.** Для нахождения волновой функции, найдём коэффи-

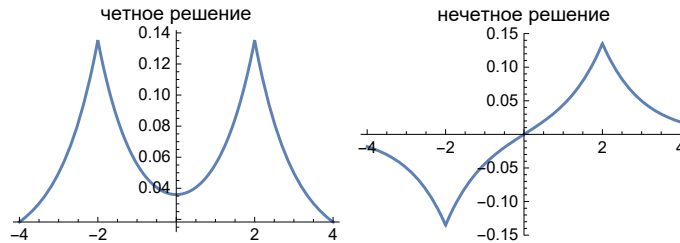


Рис. 2: Четное и нечётное решение к T5

циент  $A$  из нормируемости на 1:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_+(x)|^2 dx &= 1, \quad \Rightarrow \quad A_+^2 = \frac{\kappa}{2} \frac{(1 + e^{2a\kappa})^2}{1 + e^{2a\kappa} + 2a\kappa} \\ \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_-(x)|^2 dx &= 1, \quad \Rightarrow \quad A_-^2 = \frac{\kappa}{2} \frac{(-1 + e^{2a\kappa})^2}{-1 + e^{2a\kappa} - 2a\kappa} \end{aligned}$$

Таким образом нашли собственные функции к этой задаче.

Стоит вспомнить, что уравнение (1) – трансцендентное уравнение, где  $\kappa = \kappa(E)$ , то есть уравнение на уровни энергии. Как мы показали,  $\kappa_+$  соответствует четному решению и  $\kappa_-$  нечётному, из достаточно убедительного рисунка<sup>3</sup> №3 видно, что  $E^+ > E^-$ .

**Далекie ямы.** Рассмотрим предельный случай  $\kappa_0 a \gg 1$ , соответствующий достаточно далёким ямам, тогда  $\kappa_+ \approx \kappa_- \approx \kappa_0$ , то есть система вырождается по энергии.

**Вероятность перехода.** В силу существования чётного и нечётного решения, можем построить состояния,

<sup>2</sup>Само собой зависимость  $\psi(x)$  от  $x$ .

<sup>3</sup>Где по Ох отложена  $\kappa \sim \sqrt{E}$ , оси действительно полезно подписывать.

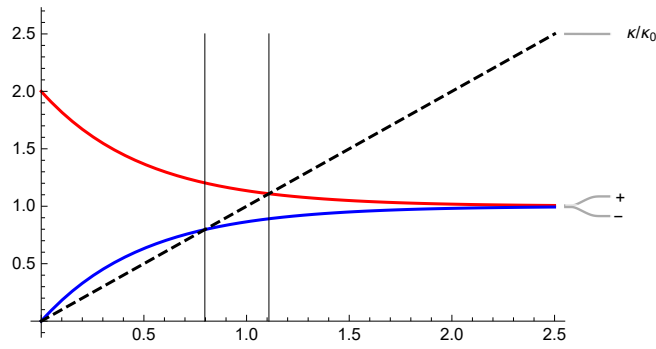


Рис. 3: Решение трансцендентного уравнения к Т5

соответствующие нахождению в правой ( $\psi_a$ ) и левой ( $\psi_{-a}$ ) ямах:

$$\begin{cases} \psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_+ + \psi_-); \\ \psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_+ - \psi_-); \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_a + \psi_{-a}); \\ \psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_a - \psi_{-a}). \end{cases}$$

Теперь, из уравнения Шрёдингера, найдём эволюцию во времени для собственных состояний:

$$i\hbar\partial_t\psi = \hat{H}\psi = -E\psi, \quad \Rightarrow \quad \psi_+(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_+t}\psi_+(x), \quad \psi_-(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_-t}\psi_-(x).$$

Для состояния  $\psi_a$  найдём зависимость от времени в базисе  $\psi_a, \psi_{-a}$ :

$$\psi_a(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_+(x, t) + \psi_-(x, t)) = \frac{1}{2} \left( \psi_a(x) \left( e^{-iE_+t/\hbar} + e^{-iE_-t/\hbar} \right) + \psi_{-a}(x) \left( e^{-iE_+t/\hbar} - e^{-iE_-t/\hbar} \right) \right).$$

Вероятность перехода можем найти, как

$$P = |\langle \psi_a(x, t) | \psi_{-a}(x) \rangle|^2 = \underbrace{\left| \frac{1}{2} \left( \int |\psi_{-a}|^2 dx \right) \right|}_{\equiv 1} \left( e^{-iE_+t/\hbar} - e^{-iE_-t/\hbar} \right)^2 = \sin^2 \left( \frac{E^+ - E^-}{2\hbar} t \right).$$

Можем чуть более явно найти вероятность, считая  $\kappa_0 a \gg 1$ , тогда

$$\kappa_+^2 \approx \kappa_0^2 + \frac{2\kappa_0^2}{e^{2\kappa_0 a}}, \quad \kappa_-^2 \approx \kappa_0^2 - \frac{2\kappa_0^2}{e^{2\kappa_0 a}}, \quad \Rightarrow \quad P = \sin^2 \left( \frac{\kappa_0^2 \hbar}{m} e^{-2\kappa_0 a} t \right).$$

## Т7

Рассмотрим движение в потенциальном поле

$$U(x) = -\frac{\hbar^2 \kappa_0}{m} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na).$$

Запишем стационарное уравнение Шрёдингера

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + U(x), \quad \hat{H}\psi(x) = E\psi(x).$$

Подставляя, находим

$$\psi''(x) - \frac{2m}{\hbar^2} (U(x) - E) \psi(x) = 0, \quad \Rightarrow \quad \psi(x) = \begin{cases} \alpha_1 e^{ikx} + \beta_1 e^{-ikx}, & x \in [0, a]; \\ \alpha_2 e^{ik(x-a)} + \beta_2 e^{-ik(x-a)}, & x \in [a, 2a]; \end{cases}$$

где рассмотрели решение на двух областях:  $[0, a]$  и  $[a, 2a]$ , и ввели  $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$ .

Запишем условие на непрерывность  $\psi(x)$  и скачок первой производной

$$\left. \begin{aligned} \psi(a + \varepsilon) &= \psi(a - \varepsilon), \\ \psi'(a + \varepsilon) - \psi'(a - \varepsilon) &= -2\kappa_0 \psi(a), \end{aligned} \right\} \Rightarrow \begin{pmatrix} \alpha_2 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} e^{ika} \left(1 - \frac{\kappa_0}{ik}\right) & -e^{-ika} \frac{\kappa_0}{ik} \\ e^{ika} \frac{\kappa_0}{ik} & e^{-ika} \left(1 + \frac{\kappa_0}{ik}\right) \end{pmatrix}$$

Здесь, для удобства, ввели связь коэффициентов через матрицу  $A$ .

В силу периодичности потенциала,  $[\hat{H}, \hat{T}_a] = 0$ , и решение может быть найдено в виде функций Блоха<sup>4</sup>

$$U(x + a) = U(x), \quad \Rightarrow \quad \psi(x + a) = e^{iKa} \psi(x).$$

<sup>4</sup> Действительно,  $\psi(x) = e^{Ka} F(x)$ , где  $F(x + a) = F(x)$ , тогда  $\psi(x + a) = e^{iKa} \psi(x)$ .

Тогда, подставляя предполагаемое решение, находим

$$\begin{pmatrix} \alpha_2 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = e^{iKa} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix}.$$

Получается, матрица  $A$  должна быть скалярна, чего можем добиться дополнительными условиями на  $\alpha$  и  $\beta$ :

$$\lambda^2 - (\text{tr } A)\lambda + \det(A) = 0, \quad \text{tr } A = e^{ika} \left(1 - \frac{\kappa_0}{ik}\right) + e^{-ika} \left(1 + \frac{\kappa_0}{ik}\right) \stackrel{\text{def}}{=} 2\rho, \quad \det A = 1.$$

Подставляя условие из  $[\hat{H}, \hat{T}_a] = 0$ , находим

$$\lambda_{1,2} = e^{\pm iKa} = \rho \pm i\sqrt{1 - \rho^2},$$

что, вроде, носит гордое имя дисперсионного соотношения. Подставляя<sup>5</sup>  $\rho$  находим выражение для  $K$ :

$$\cos(Ka) = \cos(ka) - \frac{\kappa_0}{k} \sin(ka).$$

Так как  $Ka \in \mathbb{R}$ , то дисперсионное соотношение становится условием на допустимые значения энергии и, из уравнения и достаточно убедительного рисунка, можем сделать вывод о разрешенных зонах. Действительно, для того, чтобы зона была разрешенной необходимо, чтобы

$$|\cos(k[E]a) - \frac{\kappa_0}{k[E]} \sin(k[E]a)| < 1, \quad (2)$$

на что чуть подробнее посмотрим в предельных случаях.

Построим  $|\cos(k[E]a) - \frac{\kappa_0}{k[E]} \sin(k[E]a)|$  для  $\kappa_0 a \ll 1$  (слабая связь) и  $\kappa_0 a \gg 1$  (сильная связь). Видно, что слабой связи соответствует почти непрерывный спектр  $\cos(Ka) \approx \cos(ka)$  и  $K \approx k + \frac{2\pi n}{a}$ , а сильная связь приводит к почти дискретному спектру с  $ka \approx \pi n$ .

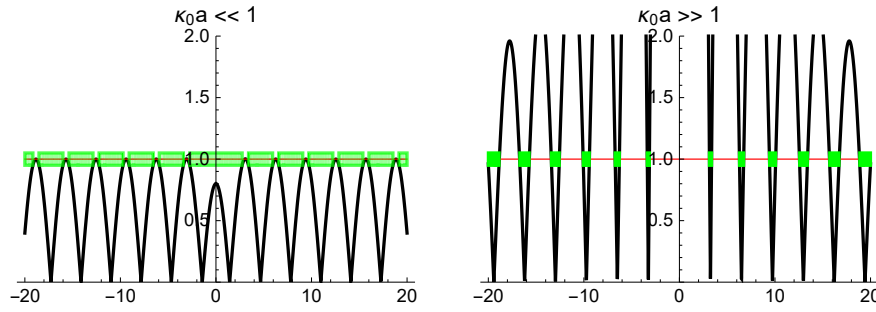


Рис. 4: Слабая и сильная связь в задаче Т7

По определению, эффективной массой частицы называется

$$m^* \stackrel{\text{def}}{=} \hbar^2 \left( \frac{d^2 E}{dK^2} \right)^{-1},$$

где  $\hbar K$  – квазиимпульс.

Считая  $k$  малым, находим

$$\frac{1}{6}k^2 (a^3 \kappa_0 - 3a^2) - a\kappa_0 + 1 = \cos(aK), \quad \Rightarrow \quad E(K) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{6}{a^2} \frac{1 - \cos(Ka) - a\kappa_0}{3 - \kappa_0 a}.$$

Тогда эффективная масса система равна

$$E''_{KK} = \frac{3\hbar^2 \cos(aK)}{m(3 - a\kappa_0)}, \quad \Rightarrow \quad m^* = m \frac{1 - a\kappa_0/3}{\cos(aK)},$$

которое  $a\kappa_0 \ll 1$  и  $aK \ll 1$  переходит в классический случай!

## Т8

Рассмотрим связанное сферически симметричное состояние частицы в сферически симметричной потенциальной яме, вида

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & r < r_0, \\ 0, & r \geq r_0, \end{cases}$$

<sup>5</sup>Имеет смысл выразить  $\rho = \cos(ak) - \frac{\kappa_0}{k} \sin(ak)$ .



в частности случаи  $\dim \in \{1, 2, 3\}$ .

Как обычно, запишем стационарное уравнение Шрёдингера, в силу связанного состояния ( $E < 0$ ) переобозначим  $E \rightarrow -E$ :

$$\hat{H}\psi = \left( \frac{\hat{p}^2}{2m} + U \right) \psi = -E\psi, \quad \Rightarrow \quad \Delta\psi - \frac{2m}{\hbar^2}(U + E)\psi = 0.$$

Раскрывая  $U(r)$ , выделяем две области:

$$\begin{cases} \Delta\psi + k^2\psi = 0, & r < r_0; \\ \Delta\psi - \kappa^2\psi = 0, & r > r_0; \end{cases} \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E), \quad \kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E.$$

Осталось раскрыть лапласиан, считая  $\psi \equiv \psi(r)$  (сферически симметричное состояние)

$$\Delta|_{\dim=1} = \partial_r^2, \quad \Delta|_{\dim=2} = \frac{1}{r}\partial_r + \partial_r^2, \quad \Delta|_{\dim=3} = \frac{2}{r}\partial_r + \partial_r^2.$$

**Одномерный случай.** Подробно разобран в Т2, здесь ограничимся только указанием итоговой охалпки диффузов и ответа:

$$\begin{cases} \psi'' + k^2\psi = 0, & r < r_0; \\ \psi'' - \kappa^2\psi = 0, & r > r_0; \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \psi^+(r) = \begin{cases} A \cos(kr), & r < r_0; \\ B e^{-\kappa r}, & r > r_0; \end{cases} \quad \psi^-(r) = \begin{cases} A \sin(kr), & r < r_0; \\ B e^{-\kappa r}, & r > r_0; \end{cases}$$

где  $\psi^+$  и  $\psi^-$  – четное и нечетное решение (в силу симметричности потенциала), а  $A$  и  $B$  известны из условий нормировки, непрерывности и гладкости.

**Двухмерный случай.** Дифференциальное уравнение на  $\psi(r)$  примет вид

$$\begin{cases} \psi'' + \frac{1}{r}\psi' + k^2\psi = 0, \\ \psi'' + \frac{1}{r}\psi' - \kappa^2\psi = 0. \end{cases}$$

В силу сферической симметрии задачи, решение может быть найден в виде функций Бесселя  $J_n$  и  $Y_n$ :

$$\psi(r) = \begin{cases} A_1 J_0(kr) + B_1 Y_0(kr), & r < r_0; \\ A_2 J_0(i\kappa r) + B_2 Y_0(-i\kappa r), & r > r_0. \end{cases}$$

В силу нормируемости  $\psi$  должно выполняться равенство  $B_2 = A_2/i$ .

Дальше вспоминаем, что  $\psi(r \leq r_0)|_{r=r_0} = \psi(r \geq r_0)|_{r=r_0}$ , также  $\psi(r \leq r_0)'|_{r=r_0} = \psi(r \geq r_0)'|_{r=r_0}$ , плюс  $\int |\psi(r)|^2 dr = 1$ , что даёт нам три уравнения, на три коэффициента. Однако ожидается дискретность спектра, так что необходимо дополнительное условие, чтобы прийти к уравнению на  $E$ .

Можно предположить, что волновой функции ненормально уходить в бесконечность (даже оставаясь  $L_2$  интегрируемой), тогда  $B_1 = 0$ , и мы получаем дискретный спектр. А может быть здесь просто не будет связанного состояния, но это было бы необычно.

**Трёхмерный случай.** Попробуем найти решение в виде  $\psi(r) = \mu(r)\nu(r)$ , где  $\mu(r) = \exp\left(-\int \frac{f(r)}{2} dr\right)$ , иногда это помогает диффурах вида  $F'' + f(r)F' + F = 0$ :

$$\begin{cases} \psi'' + \frac{2}{r}\psi' + k^2\psi = 0, & r < r_0; \\ \psi'' + \frac{2}{r}\psi' - \kappa^2\psi = 0, & r > r_0; \end{cases} \quad \nu(r) = e^{-\ln r} = \frac{1}{r}, \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \nu'' + k^2\nu = 0, & r < r_0; \\ \nu'' - \kappa^2\nu = 0, & r > r_0. \end{cases}$$

А такое уравнение на  $\nu(r)$  уже решается, итог находим

$$\psi(r) = \begin{cases} \frac{A_1}{r}e^{-ikr} + \frac{B_1}{r}e^{ikr}, & r < r_0; \\ \frac{A_2}{r}e^{-\kappa r} + \frac{B_2}{r}e^{\kappa r}, & r > r_0. \end{cases}$$

Осталось наполнить это физическим смыслом: при  $r > r_0$  требование нормировки приведет к  $B_2 = 0$ , при  $r < r_0$  для наглядности перепишем в тригонометрических функциях:

$$\psi(r < r_0) = -\frac{iA_1 \sin(kr)}{r} + \frac{A_1 \cos(kr)}{r} + \frac{iB_1 \sin(kr)}{r} + \frac{B_1 \cos(kr)}{r}, \quad \Rightarrow \quad B_1 = -A_1,$$

из того же требования нормируемости функции.

Из непрерывности в  $r = r_0$  находим:

$$\psi(r \leq r_0)|_{r=r_0} = \psi(r \geq r_0)|_{r=r_0}, \quad \Rightarrow \quad A_2 = -2iA_1 e^{r_0\kappa} \sin(kr_0).$$

Выразив все коэффициенты через  $A_1$ , подставим их в условие гладкости  $\psi(r)$ :

$$\psi(r \leq r_0)'|_{r=r_0} = \psi(r \geq r_0)'|_{r=r_0}, \quad \Rightarrow \quad k \cos(kr_0) + \kappa \sin(kr_0) = 0, \quad \Rightarrow \quad \boxed{k[E] = -\kappa[E] \cdot \operatorname{tg}(k[E]r_0)},$$

это трансцендентное уравнение на  $E$  имеет решения, соответственно выделяет дискретный спектр уровней энергии.

Осталось найти  $A_1$  из условия нормировки, к сожалению через элементарные функции у меня это условие

не выражается, возможно выше была вычислительная ошибка, но система  $\pm$  физична. Для начала посчитаем плотность вероятности

$$|\psi(r < r_0)|^2 = \frac{4A_1^2 (k \cos(k(r - r_0)) - \kappa \sin(k(r - r_0)))^2}{r^2 (\kappa^2 + k^2)}, \quad |\psi(r > r_0)|^2 = \frac{4A_1^2 k^2 e^{2\kappa(r_0 - r)}}{r^2 (\kappa^2 + k^2)}.$$

тогда условие нормировки:

$$\int_0^{r_0} |\psi(r < r_0)|^2 dr + \int_{r_0}^{\infty} |\psi(r > r_0)|^2 dr = 1, \quad \Rightarrow \quad A_1^{-2} = 8e^{2\kappa r_0} \text{Ei}(-2r_0\kappa) \sin(kr_0)^2 + 4k \text{Si}(2kr_0),$$

где Si – интегральный синус, Ei – интегральная экспонента, таким образом нашли волновую функцию и уровни энергии:

$$\psi(r) = 2A_1 \begin{cases} \sin(kr)/r, & r < r_0; \\ \sin(kr_0) e^{\kappa(r_0 - r)}/r, & r > r_0. \end{cases}$$

## Т9

Найдём уровни энергии трёхмерного изотропного гармонического осциллятора в ПДСК. Запишем уравнение Шрёдингера примет вид

$$\hat{H}\psi = E\psi,$$

и перейдём к безразмерным величинам

$$\hat{Q} = \frac{\hat{q}}{q_0}, \quad \hat{P} = \frac{\hat{p}}{p_0} = -i\partial_Q, \quad p_0 = \sqrt{m\omega\hbar}, \quad q_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad \Rightarrow \quad \hat{H}_Q = \frac{1}{2} (Q^2 + \hat{P}^2) = \hat{H}/(\hbar\omega).$$

Для благоприятного разделения переменных<sup>6</sup> представим  $\psi(x, y, z) = \psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z)$ , и  $E = E_x + E_y + E_z$ :

$$\frac{1}{2} (x^2 + y^2 + z^2 - (\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2)) \psi_x \psi_y \psi_z = \frac{1}{\hbar\omega} (E_x + E_y + E_z) \psi_x \psi_y \psi_z.$$

Нетрудно получить

$$\left( x^2 - \frac{\psi_x''(x)}{\psi_x(x)} - \frac{2E_x}{\hbar\omega} \right) \psi_x \psi_y \psi_z + \dots \left( z^2 - \frac{\psi_z''(z)}{\psi_z(z)} - \frac{2E_z}{\hbar\omega} \right) \psi_x \psi_y \psi_z = 0,$$

таким образом переменные разделились и мы получили три независимых уравнения одномерных осцилляторов:

$$\begin{cases} \psi_x''(x) + \left( \frac{2E_x}{\hbar\omega} - x^2 \right) \psi_x(x) = 0, \\ \psi_y''(y) + \left( \frac{2E_y}{\hbar\omega} - y^2 \right) \psi_y(y) = 0, \\ \psi_z''(z) + \left( \frac{2E_z}{\hbar\omega} - z^2 \right) \psi_z(z) = 0. \end{cases} \quad \Rightarrow \quad E_i = \hbar\omega \left( \frac{1}{2} + n_i \right).$$

Так приходим к выражению для энергии изотропного гармонического осциллятора через число квантов по каждой из осей:

$$E = E_x + E_y + E_z = \hbar\omega \left( \frac{3}{2} + n_x + n_y + n_z \right),$$

где явно видно вырождение уровней энергии, при  $n_x + n_y + n_z = n$ . Нетруно посчитать<sup>7</sup>, что

$$\#(n) = \text{card} \{ (n_x, n_y, n_z) \mid n_x + n_y + n_z = n \} = \frac{(n+1)(n+2)}{2},$$

что и является кратностью вырождения.

Заметим, что  $\#(0) = 1$ ,  $\#(1) = 3$ ,  $\#(2) = 6$ , тогда

$$2 \cdot (\#(0)) = 2,$$

$$2 \cdot (\#(0) + \#(1)) = 8,$$

$$2 \cdot (\#(0) + \#(1) + \#(2)) = 20,$$

что намекает на некоторую связь с магическими числами (ЛЛЗ, §118: модель оболочек).

<sup>6</sup>Здесь и далее  $\mathbf{Q} = (x, y, z)^T$  – безразмерные для удобства переменные.

<sup>7</sup> $n \geq 0$ .