Билеты по квантовой механике

Авторы заметок: Хоружий Кирилл
Примак Евгений

От: *21 декабря 2021 г.*

То, что остаётся после всех этих абстракций, не следует ли... считать тем реальным и неизменным содержанием, которое навязывается существам всех видов с одинаковой необходимостью, потому что оно не зависит ни от индивида, ни от момента времени, ни от точки зрения?

В. И. Ленин

Содержание

1 Задачи

Задача №2

> Вычислить $[x,\, \hat{p}^2]$, $[U(x),\, \hat{p}]$, $[U(x),\ \hat{p}^2]$.

В координатном представлении $\hat{x} = x$ и $\hat{p}_x = -i\hbar\partial_x$, тогда $\hat{p}_x^2 = -\hbar^2\partial_x^2$.

0) Начнём с нулевого примера, чтобы убедиться, что правильно смотрим на мир:

$$[\hat{x},\, \hat{p}]\psi(x) = x(-i\hbar)\partial_x\psi - (-i\hbar)\partial_x(x\psi) = i\hbar\psi + i\hbar x\partial_x\psi - i\hbar x\partial_x\psi = i\hbar\psi,$$
$$\Rightarrow \quad [\hat{x},\, \hat{p}] = i\hbar.$$

а) Аналогично, в смысле операторного равенства,

$$[\hat{x},\, \hat{p}^2]\psi(x) = x(-i\hbar)^2\partial_x^2\psi - (-i\hbar)^2\partial_x^2(x\psi) = -\hbar^2 x\partial_x^2\psi + \hbar^2\partial_x(\psi + x\partial_x\psi) =$$
$$= -\hbar^2 x\partial_x^2\psi + \hbar^2\partial_x\psi + \hbar^2\partial_x\psi + \hbar^2 x\partial_x^2\psi = 2i\hbar\hat{p}\psi,$$
$$\Rightarrow [\hat{x},\, \hat{p}^2] = 2i\hbar\hat{p}.$$

б) Теперь найдём коммутатор с некоторой функцией $U(x)$:

$$[U(\hat{x}),\, \hat{p}]\psi(x) = U(x)(-i\hbar\partial_x\psi) + i\hbar\partial_x(U\psi) = U(-i\hbar\partial_x\psi) + i\hbar(\psi\partial_x U + U\partial_x\psi) = i\hbar(\partial_x U)\psi,$$
$$\Rightarrow [U(\hat{x}),\, \hat{p}] = 2i\hbar\hat{p}.$$

в) Наконец,

$$[U(\hat{x}),\, \hat{p}^2]\psi(x) = U(-\hbar^2)\partial_x^2\psi + \hbar^2\partial_x^2 U\psi = U(-\hbar^2)\psi'' + \hbar^2(\psi U'' + 2U'\psi' + \psi'' U) =$$
$$= \hbar^2(\psi U'' + 2U'\psi') = (\hbar^2 U'' + \hbar 2iU'\hat{p})\psi,$$
$$\Rightarrow [U(\hat{x}),\, \hat{p}^2] = \hbar^2 U'' + 2i\hbar U'\hat{p}.$$

Задача №3

> Доказать соотноешния Фейнмана-Гельмана $\partial_\lambda f_n(\lambda) = \langle n|\partial_\lambda \hat{f}(\lambda)|n\rangle$, где f_n – собственное значение $\hat{f}\,|n\rangle = f_n\,|n\rangle$, то есть $f_n = \langle n|\hat{f}|n\rangle$.

$\triangle$. По формуле Лейбница:

$$\partial_\lambda f_n = \langle n|\partial_\lambda\hat{f}|n\rangle + \langle\partial_\lambda n|\hat{f}|n\rangle + \langle n|\hat{f}|\partial_\lambda n\rangle = \langle n|\partial_\lambda\hat{f}|n\rangle + \langle\partial_\lambda n|n\rangle f_n + \langle n|\partial_\lambda n\rangle f_n =$$
$$= \langle n|\partial_\lambda\hat{f}|n\rangle + f_n\partial_\lambda\langle n|n\rangle = \langle n|\partial_\lambda\hat{f}|n\rangle,$$

что и требовалось доказать.

$\square$

Задача №4

> Найти операторы рождения и уничтожения для гармонического осцилляора в представлении Гейзенберга.

I. Запишем уравнение Гейзенберга

$$i\hbar\frac{\hat{df}}{dt} = i\hbar\frac{\partial\hat{f}}{\partial t} + \left[\hat{f},\, \hat{H}\right].$$

Запищем гамильтониан системы

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right),$$

тогда можем найти

$$i\hbar\frac{\hat{da}}{dt} = \hbar\omega\left[\hat{a},\, \hat{a}^\dagger\hat{a}\right] = \hbar\omega\left(\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}\right) = \hbar\omega\left(\left[\hat{a},\, \hat{a}^\dagger\right]\hat{a}\right) = \hbar\omega\hat{a},$$

и, решая диффур, находим

$$i\hbar\frac{\hat{da}}{dt} = \hbar\omega\hat{a}, \qquad \Rightarrow \qquad \begin{cases} \hat{a}(t) = e^{-i\omega t}\hat{a}, \\ \hat{a}^\dagger(t) = e^{i\omega t}\hat{a}^\dagger. \end{cases}$$

II. Можно было напрямую, воспользоваться

$$\hat{U}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right), \quad \Rightarrow \quad \hat{a}(t) = \hat{a} + (i\omega t)[\hat{a}^\dagger\hat{a},\, \hat{a}] + (i\omega t)^2[\hat{a}^\dagger\hat{a},\, -\hat{a}] + \ldots = \exp(-i\omega t)\hat{a},$$

где мы воспользовались равенством, доказанным в У6:

$$e^{\xi A}Be^{-\xi A} = B + \xi[A, B] + \frac{1}{2!}\xi^2\left[A, [A, B]\right] + \ldots$$

Задача №7

> Найти уровни энергии и волновые функции стационарных состояний частицы в потенциальном ящике
> $$U(x) = \begin{cases} 0, & x \in [0, a], \\ +\infty, & x \in \mathbb{R}\backslash[0, a]. \end{cases}$$

Стационарное уравнение Шрёдингера:

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x), \quad \Rightarrow \quad \psi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0.$$

Тогда решение может быть найдено в виде

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

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 ψ 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 волнавая функция стационарных состояний и соответсвующие уровни энергии

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

Задача №8

> Найти уровни энергии[a] и волновые функции стационарных состояний частицы в потенциале $U(x) = -\frac{\hbar^2}{m}\varkappa_0\delta(x)$.
>
> [a]Формально «уровень энергии», δ-ямая – всегда мелкая яма, то есть $\exists!$ связное состояние.

Координатное представление. Сделаем замечание, что $E < 0$, тогда получим

$$\hat{H}\psi = -|E|\psi, \quad \varkappa^2 \overset{\text{def}}{=} \frac{2m|E|}{\hbar}.$$

С такой заменой получим:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' - \frac{\hbar^2}{m}\varkappa_0\delta(x)\psi + |E|\psi = 0 \quad \Rightarrow \quad \psi'' - (\varkappa - 2\varkappa_0\delta(x))\psi = 0.$$

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 ψ, из-за дельта функции, мы получаем разрыв для первой производной

$$\psi'' - (\varkappa - 2\varkappa_0\delta(x))\psi = 0 \quad \overset{\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}}{\Longrightarrow} \quad \psi'(+0) - \psi'(-0) = -2\varkappa_0\psi(0).$$

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

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

Из непрерывности получим автоматически, что

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

Разрыв же первой производной позволит нам найти

$$\psi'(+0) - \psi'(-0) = -2\varkappa_0\psi(0) \quad\Rightarrow\quad -2\varkappa_0 C = C(-\varkappa - \varkappa) \quad\Rightarrow\quad \varkappa = \varkappa_0.$$

Таким образом энергия связного состояния:

$$E = -\frac{\hbar^2\varkappa_0^2}{2m}.$$

Теперь, осталось проверить нормировку нашей волновой функции

$$\int_{\mathbb{R}} \psi\psi^* dx = 1 \quad\Rightarrow\quad C^2\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\varkappa_0|x|}dx = \frac{C^2}{\varkappa_0}\int_0^{+\infty} e^{-2\varkappa_0 x} d2\varkappa_0 x = \frac{C^2}{\varkappa_0} = 1 \quad\Rightarrow\quad \varkappa_0 = C^2.$$

Таким образом собирая всё вместе получаем волновую функцию вида:

$$\langle x|0\rangle = \psi(x) = \sqrt{\varkappa_0}e^{-\varkappa_0|x|}.$$

Импульсное представление. Вставляя разбиение единицы, вида $\mathbb{1} = \int_{\mathbb{R}} |x\rangle\langle x|\,dx$, находим

$$\psi(p) = \langle p|0\rangle = \int_{\mathbb{R}} dx\langle p|x\rangle\langle x|0\rangle = \Big/ \langle p|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\frac{i}{\hbar}px} \Big/ = \frac{\sqrt{\varkappa_0}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{\mathbb{R}} e^{-\varkappa_0 x - \frac{i}{\hbar}px}dx = \frac{\sqrt{\varkappa_0}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\cdot\frac{2\varkappa_0}{\varkappa_0^2 + (p/\hbar)^2} = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{(\varkappa_0\hbar)^{3/2}}{(\varkappa_0\hbar)^2 + p^2}.$$

Задача №8

> Найти волновую функцию, минимизирующую соотношение неопределенностей $\Delta x\cdot\Delta p = \hbar/2$.

Возьмём операторы импульса $\hat{p} = -i\hbar\partial_x$ и координаты $\hat{x}$. Сразу найдём их средние и коммутатор

$$\bar{x} = \langle x\rangle = \langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle, \qquad \bar{p} = \langle p\rangle = \langle\psi|\hat{p}|\psi\rangle, \qquad [\hat{x},\hat{p}] = i\hbar.$$

Перейдём к несмещенным переменным:

$$\hat{\xi} = \hat{x} - \bar{x}, \qquad \hat{\eta} = \hat{p} - \bar{p}, \qquad [\hat{\xi},\hat{\eta}] = i\hbar.$$

С неизмененным значением дисперсии

$$(\Delta\xi)^2 = \langle\psi|(\hat{\xi} - \bar{\xi})|\psi\rangle = \langle\psi|(\hat{x} - \bar{x})|\psi\rangle = (\Delta x)^2, \qquad (\Delta\eta)^2 = (\Delta p)^2.$$

Теперь введем функцию Φ по методу Вейля

$$|\Phi\rangle = \left(\hat{\xi} - i\gamma\hat{\eta}\right)|\psi\rangle\,.$$

И, по определению нормы, $\langle\Phi|\Phi\rangle \geqslant 0$, а значиты

$$\langle\psi|(\hat{\xi} - i\gamma\hat{\eta})^\dagger(\hat{\xi} - i\gamma\hat{\eta})|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{\xi}^2 - i\gamma(\hat{\xi}\hat{\eta} - \hat{\eta}\hat{\xi}) + \gamma^2\hat{\eta}^2|\psi\rangle \geqslant 0.$$

Неотрицательной должно быть и выражение

$$(\Delta x)^2 + \hbar\gamma + \gamma^2(\Delta p)^2 \geqslant 0 \qquad\Rightarrow\qquad \hbar^2 - 4(\Delta p)^2(\Delta x)^2 \leqslant 0,$$

что получилось просто из условия на дискриминант для квадратного уравнения на γ, тогда минимум достигнется просто при нулевом дискриминанте

$$(\Delta p)^2(\Delta x)^2 = \frac{\hbar}{4}, \qquad \gamma = -2\frac{(\Delta x)^2}{\hbar}.$$

Таким образом и нашли волновую функцию, которая удовлетворяет минимизации соотношения неопределенности, что мы четко и показали

$$|\Phi\rangle = \left[\hat{x} - \bar{x} + \tfrac{2i}{\hbar}(\Delta x)^2(\hat{p} - \bar{p})\right]|\psi\rangle\,,$$

для некоторой $\forall\psi$.