

БИЛЕТЫ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Авторы заметок: Хоружий Кирилл
Примак Евгений

От: 22 декабря 2021 г.

Я так давно родился,
Что слышу иногда,
Как надо мной проходит
Студёная вода.

...
Я так давно родился,
Что говорить не могу,
И город мне приснился
На каменном берегу.

А я лежу на дне речном
И вижу из воды
Далекий свет, высокий дом,
Зелёный луч звезды.

A. A. Тарковский



Также выражаем благодарность Гурьевой Соне и Мещерякову Паше за консультации по отдельным задачам.

Содержание

1 Задачи	3
Задача №1	3
Задача №2	3
Задача №3	3
Задача №4	4
Задача №5	4
Задача №7	4
Задача №8	5
Задача №8	5

1 Задачи

Задача №1

Найти собственные значения и собственные функции оператора трансляции \hat{T}_a . Также рассказать про «квазимпульс», «функции Блоха» и «зону Бриллюэна».

Оператор трансляции работает $\hat{T}_a |x\rangle = |x+a\rangle$ или так $\langle x|T_a\Psi\rangle = \Psi(x+a)$. **Написать про пассивные и активные преобразования.**

Оператор трансляции унитарный, а для унитарного оператора \hat{A} и его собственных состояний $\hat{A}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$ легко показать, что

$$\langle A\lambda|A\lambda\rangle = \langle\lambda|A^\dagger A\lambda\rangle = \langle\lambda|\lambda\rangle, \quad \langle A\lambda|A\lambda\rangle = \lambda\lambda^*\langle\lambda|\lambda\rangle \Rightarrow \langle\lambda|\lambda\rangle = 1 = \lambda\lambda^*.$$

Тогда имеем $\lambda = e^{i\varphi}$, что приводит к самому виду оператора $\hat{A} = e^{i\hat{\varphi}}$, где $\hat{\varphi}$ – эрмитов.

Оператор трансляции запишем в виде $\hat{T}_a = e^{i\hat{\varphi}}$, и оператор фазы $\hat{\varphi} = \frac{1}{\hbar}\mathbf{a}\cdot\hat{\mathbf{k}}$, где $\hat{\mathbf{k}}$ – оператор квазимпульса.

Собственные же волновые функции для \hat{T}_a выразим в координатном представлении

$$\hat{T}_a |\Psi\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}a\cdot\mathbf{k}} |\Psi\rangle \Rightarrow \langle \mathbf{r}|T_a|\Psi\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}a\cdot\mathbf{k}} |\Psi\rangle.$$

Они удовлетворяют уравнению

$$\Psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = e^{\frac{i}{\hbar}a\cdot\mathbf{k}} \Psi(\mathbf{r}) \Rightarrow \Psi(\mathbf{r}) = e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{r}\cdot\mathbf{k}} \Phi(\mathbf{r}), \quad \Phi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = \Phi(\mathbf{r}),$$

и называются функциями Блоха.

Собственные значения выражаются в виде $\lambda = e^{\frac{i}{\hbar}a\cdot\mathbf{k}}$.

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:

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

a) Аналогично, в смысле операторного равенства,

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

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

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

в) Наконец,

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

Задача №3

Доказать соотношение 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:

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

что и требовалось доказать. □

Задача №4

| Найти операторы рождения и уничтожения для гармонического осциллятора в представлении Гейзенберга.

I. Запишем уравнение Гейзенберга

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

Запишем гамильтониан системы

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

тогда можем найти

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

и, решая диффур, находим

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

II. Можно было напрямую, воспользоваться

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

где мы воспользовались равенством, доказанным в У6:

$$e^{\xi A} B e^{-\xi A} = B + \xi [A, B] + \frac{1}{2!} \xi^2 [A, [A, B]] + \dots$$

Задача №5

| Выключить коммутаторы $[l_\alpha, x_\beta]$, $[l_\alpha, p_\beta]$.

Для векторной величины \mathbf{a} коммутатор можно найти, как

$$[l_\alpha, a_\beta] = i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} a_\gamma,$$

где $\hat{l}_\alpha = -i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} r_\beta \partial_\gamma$, или $\hat{L}_\alpha = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{r}_\beta \hat{p}_\gamma$.

Дописать.

Задача №7

| Найти уровни энергии и волновые функции стационарных состояний частицы в потенциальном ящике

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x \in [0, a], \\ +\infty, & x \in \mathbb{R} \setminus [0, a]. \end{cases}$$

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

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

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 волновая функция стационарных состояний и соответствующие уровни энергии

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

Задача №8

Найти уровни энергии^a и волновые функции стационарных состояний частицы в потенциале $U(x) = -\frac{\hbar^2}{m}\kappa_0\delta(x)$.

^aФормально «уровень энергии», δ -ямая – всегда мелкая яма, то есть $\exists!$ связное состояние.

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

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

С такой заменой получим:

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

Мы ожидаем непрерывности от волновой 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

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

Вне ямы будем наблюдать спад по экспоненте, сама же яма – по сути точечна, значит такое же поведение будем ожидать и в связном 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

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

Разрыв же первой производной позволит нам найти

$$\psi'(+0) - \psi'(-0) = -2\kappa_0\psi(0) \quad \Rightarrow \quad -2\kappa_0C = C(-\kappa - \kappa) \quad \Rightarrow \quad \kappa = \kappa_0.$$

Таким образом энергия связного состояния:

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

Теперь, осталось проверить нормировку нашей волновой функции

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

Таким образом собирая всё вместе получаем волновую функцию вида:

$$\langle x|0\rangle = \psi(x) = \sqrt{\kappa_0} e^{-\kappa_0|x|}.$$

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

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

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

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

Перейдём к несмещенным переменным:

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

С неизмененным значением дисперсии

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

Теперь введем функцию Φ по методу Вейля

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

И, по определению нормы, $\langle \Phi | \Phi \rangle \geq 0$, а значит

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

Неотрицательной должно быть и выражение

$$(\Delta x)^2 + \hbar\gamma + \gamma^2(\Delta p)^2 \geq 0 \quad \Rightarrow \quad \hbar^2 - 4(\Delta p)^2(\Delta x)^2 \leq 0,$$

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

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

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

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

для некоторой $\forall \psi$.