

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Чумаченко Артем Васильович
Теслик Максим Вікторович
Теслик Олена Миколаївна
Приходько Олена Олександрівна
Вільчинський Станіслав Йосипович

Квантова механіка

методичні рекомендації до практичних занять

Київ – 2020

ЗМІСТ

Вступ	4
1 Наближені методи квантової механіки.	7
1.1. Квазікласичне наближення.	7
1.2. Стаціонарна теорія збурень за відсутності виродження.	7
1.3. Стаціонарна теорія збурень для вироджених станів. Ефект Штарка у атомі водню.	8
1.4. Варіаційний метод Рітца.	8
2 Релятивістська квантова механіка частинок зі спіном $s = 1/2$.	10
2.1. Матриці Паулі, Дірака у різних представленнях. Оператор спіну \hat{S} . Розклад по базису гама-матриць. . . .	10
2.2. Релятивістська інваріантність рівняння Дірака. . . .	10
2.3. Атом водню в теорії Клейна-Гордона-Фока.	11
2.4. Атом водню в теорії Дірака (частина 1)	11
2.5. Атом водню в теорії Дірака (частина 2)	12
2.6. Прямокутний потенціал скінченної глибини в теорії Дірака. Парадокс Клейна.	12
2.7. Частинка з півцілим спіном у постійному магнітному полі. Рівні Ландау.	13
2.8. Частинка з півцілим спіном у змінному магнітному полі.	14
3 Квантування електромагнітного поля та його взаємодія з атомом.	15
3.1. Ефект Казіміра.	15
3.2. Теорія випромінювання та поглинання світла. Правила відбору.	15
3.3. Квантова теорія дисперсії світла.	16
3.4. Теорія Фотоефекту.	16
3.5. Ширина спектральних ліній	17
4 Елементи теорії розсіювання.	18
4.1. Теорія пружного розсіювання.	18
4.2. Теорія непружного розсіювання.	18

5	Багатоелектронні задачі квантової механіки.	19
5.1.	Квантова механіка багатьох частинок. Атом гелію. .	19
5.2.	Енергія іонізації йону водню.	19
5.3.	Метод Гартрі-Фока. Наближення Томаса-Фермі. . . .	20
	Додаткові задачі підвищеної складності	21
	Література	28

Вступ

Методичні рекомендації до практичних занять з курсу „Квантова механіка” містять докладний план практичних занять та обов’язкові задачі на другий семестр даного курсу, додаток з задачами підвищеної складності, список збірників задач, які використовуються на практичних заняттях. Видання призначено для студентів третього курсу фізичного факультету КНУ імені Тараса Шевченка та викладачів, що проводять практичні заняття.

Усі практичні заняття разом з домашніми завданнями, запитаннями для самоперевірки та літературою для підготовки викладено на Google Classroom код класу **rg233hl**

стала Планка

число

маса спокою електрона

елементарний заряд

Борівський радіус

стала Рідберга

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 6.62559 \cdot 10^{-27} / 2\pi \text{ ерг-сек};$$

$$\pi = 3.14159265359;$$

$$m_e = 9.10908 \cdot 10^{-28} \text{ г};$$

$$e = 4.80298 \cdot 10^{-10};$$

$$a = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = 5.2917720859(36) \cdot 10^{-11} \text{ м};$$

$$R = 10973731.568539 \text{ м}^{-1}.$$

Теми практичних занять. Другий семестр.

1

Наближені методи квантової механіки.

1.1. Квазікласичне наближення.

Пояснення методу Вентцеля-Крамерса-Бріллюена. Отримання правила квантування Бора-Зомерфельда:

1. для потенціалу скінченної глибини;
2. для напів нескінченного потенціалу (нескінченна стінка зліва або справа).

Отримання коефіцієнтів проходження та відбиття від бар'єру у квазікласичному наближенні. Як приклад розв'язується задача про холодну емісію електронів з металу під дією електричного поля.

Домашнє завдання: Отримати правило квантування Бора-Зомерфельда для потенціалу з двома нескінченними стінками. Отримати вирази для коефіцієнтів відбиття та проходження у квазікласичному наближенні для потенціалу скінченної висоти шириною $2a$, де $a > 0$ – деяка константа.

Матеріали для підготовки: І.О. Вакарчук [1] с.254-274; І.В. Копыткін [2] с.5-12; А.Б. Мигдал [3] с.117-132.

1.2. Стаціонарна теорія збурень за відсутності виродження.

Пояснення основ теорії збурень. Наведення формул для поправок до значень енергії незбуреної задачі у першому та другому порядку теорії збурень. Отримання поправки:

1. першого порядку теорії збурень до рівнів енергії одновимірного гармонічного осцилятора від збурення у вигляді βx^4 , використовуючи для цього оператори народження та знищення;
2. до енергій гармонічного осцилятора з точністю $\mathcal{O}(\hbar^2)$ від збурення у вигляді $\alpha x^3 + \beta x^4$, використовуючи для цього оператори народження та знищення.

Отримання енергії основного стану для потенціалу Морзе на основі стаціонарної теорії збурень, використовуючи в якості незбуреної задачі одновимірний гармонічний осцилятор. Порівняти результат з точним значенням енергії основного стану для потенціалу Морзе.

Домашнє завдання: Розрахувати енергію основного стану потенціалу Пешля-Телера на основі стаціонарної теорії збурень, використовуючи в якості незбуреної задачі одновимірний гармонічний осцилятор. Порівняти результат з точним значенням енергії основного стану для потенціалу Пешля-Телера.

Матеріали для підготовки: І.О. Вакарчук [1] с.399-408; І.В. Копыткін[2] с.17, А.В. Шорохов [5] с.44.

1.3. Стаціонарна теорія збурень для вироджених станів. Ефект Штарка у атомі водню.

1. Отримання зсуву енергії для лінійного ефекту Штарка коли атом водню знаходиться у основному стані $n = 1$;
2. Отримання зсуву енергії для лінійного ефекту Штарка коли атом водню знаходиться у першому збудженому стані $n = 2$. Розрахунок енергії розщеплення стану та хвильових функцій отриманих рівнів.

Домашнє завдання: Розрахувати лінійний ефект Штарка для стану $n = 3$ атома водню. Отримати розщеплення стану та хвильові функції отриманих рівнів енергії.

Матеріали для підготовки: І.О. Вакарчук [1] с.438, Д.И. Блохинцев [9] с.228.

1.4. Варіаційний метод Рітца.

1. Отримання енергії основного стану гармонічного осцилятора використовуючи пробну функцію у вигляді $\Psi_0 = A \exp[-\alpha x^2]$;
2. Отримання енергії першого збудженого стану гармонічного осцилятора на основі функції $\Psi_1 = Ax \exp[-\alpha x^2]$;
3. Отримання варіаційним методом енергії основного стану атома водню. Пробну функцію обираємо у вигляді $\Psi(r, \beta) = Ae^{-\beta r}$ з варіаційним параметром $\beta > 0$;

4. Обчислення варіаційним методом енергії першого збудженого стану $2s$ атома водню. Пробну функцію обираємо двопараметричну $\Psi(r; \alpha, \beta) = B \left(1 + \gamma \frac{Zr}{a_0}\right) \exp\left(-\alpha \frac{r}{a_0}\right)$, з варіаційними параметрами $\alpha > 0$ і $\gamma < 0$.

Домашнє завдання: Отримати значення енергії основного стану гармонічного осцилятора на основі функцій $\Psi_0 = A(1+x^2/a^2)^{-1}$, $\Psi_0 = A(1+x^2/a^2)^{-2}$, $\Psi_0 = A \exp[-\alpha|x|]$ та першого збудженого стану $\Psi_1 = Ax \exp[-\alpha|x|]$ порівняти результат з точним значенням.

Матеріали для підготовки: І.О. Вакарчук [1] с. 450, И.В. Копытин [2] с.35-39.

2

Релятивістська квантова механіка частинок зі спіном $s = 1/2$.

2.1. Матриці Паулі, Дірака у різних представленнях. Оператор спіну \hat{S} . Розклад по базису гама-матриць.

1. Перевірка властивостей матриць Паулі;
2. Перевірка властивостей матриць Дірака;
3. Розрахунок комутаторів операторів $[\hat{S}, \hat{H}_D]$ та $[\hat{L}, \hat{H}_D]$, де \hat{H}_D – гамільтоніан Дірака. Доведення твердження про збереження повного моменту кількості руху у теорії Дірака.
4. Отримання матриць Дірака у представленні Вейля та Майорани;
5. Введення гама-матриць, побудова базису у просторі матриць 4×4 , розклад по базису гама-матриць.

Домашнє завдання: Розкласти по базису гама-матриць наступні добутки $\gamma^\alpha \gamma^\beta \gamma_5$, $\gamma^\alpha \gamma^\beta \gamma^\sigma$.

Матеріали для підготовки: Дж. Д. Бьєркен [11] с.24, Ф. Дайсон [16] с.41., Good, R. H. [6], А. Мессиа [7] с. 361.

2.2. Релятивістська інваріантність рівняння Дірака.

1. Отримання виразів для оператора перетворення \hat{S} , що визначається умовою $\Psi' = \hat{S}\Psi$, де Ψ' стан квантової системи у теорії Дірака після перетворення Лоренца (повороти, трансляції та інверсія);
2. Отримання законів перетворення елементів базису гама-матриць при перетвореннях Лоренца (скаляр Лоренца, псевдовектор, псевдоскаляр).

Домашнє завдання: Довести, що S матриця перетворення для біспінора задовольняє співвідношенню $S^{-1} = \gamma_0 S^+ \gamma_0$ при власних і невластних перетвореннях Лоренца.

Матеріали для підготовки: Дж. Д. Бьєркен [11] с.24, Ф. Дайсон [16] с.22, А. Мессиа [7] с.380.

2.3. Атом водню в теорії Клейна-Гордона-Фока.

1. Розділенням змінних у рівнянні Клейна-Гордона-Фока зводимо задачу про пошук спектру атома водню до розв'язку радіального рівняння. Порівнюємо отримане радіальне рівняння з аналогічним з теорії Шредінгера;
2. Отримуємо спектр енергій електрона у атомі водню в теорії Клейна-Гордона-Фока в залежності від сталої тонкої структури

$$E_n = mc^2 \left[1 + \frac{\alpha^2}{\left[n + \frac{1}{2} + \left(l + \frac{1}{2} \right) \left(1 - \frac{\alpha^2}{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2} \right)^{1/2} \right]^2} \right]^{-1/2}.$$

Домашнє завдання:

1. Отримати розклад спектру за константою слабкого зв'язку $\alpha = 1/137$ до членів порядку α^2 ;
2. Порівняти отриманий розклад зі спектром електрона у атомі водню в теорії Шредінгера.

Матеріали для підготовки: І.О. Вакарчук [1] с.567, А. Мессиа [7] с.370.

2.4. Атом водню в теорії Дірака (частина 1)

1. Перетворення оператора $c\vec{\alpha}\vec{p}$ у рівнянні Дірака на суму двох доданків $c\alpha_r p_r + \frac{ic\hbar}{r}\alpha_r\beta\hat{K}$, що залежать від радіальної та кутових змінних відповідно, де

$$\alpha_r = \frac{\vec{r}}{r}\vec{\alpha}, \quad p_r = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right),$$

$\vec{\alpha}$ та β – матриці Дірака.

- Отримання власних значень оператора \hat{K} , що задається співвідношенням

$$\hbar \hat{K} = \beta \left[(\vec{S}\vec{L}) + \hbar \right],$$

де $\hbar \vec{S}/2$ – оператор спіну, \vec{L} – оператор моменту кількості руху.

Домашнє завдання: Показати, що оператора \hat{K} має спільну систему власних функцій з операторами \hat{J}^2 , \hat{J}_z та \hat{H}_D – гамільтоніан Дірака для атома водню.

Матеріали для підготовки: І.О. Вакарчук [1] с.635, А.М. Федорченко [8] с.169.

2.5. Атом водню в теорії Дірака (частина 2)

- Отримання спектру атома водню в теорії Дірака за методом асимптотик;
- Порівняння отриманого виразу для спектру зі спектрами атома водню в теорії Клейна-Гордона-Фока та Шредінгера;
- Розрахунок кратності виродження отриманих енергетичних рівнів.

Домашнє завдання: Заповнити таблицю ієрархії станів для головного квантового числа від $n = 1$ до $n = 5$. Записати явний вигляд власних функцій електрона для атома водню в теорії Дірака.

Матеріали для підготовки: І.О. Вакарчук [1] с.635, А.М. Федорченко [8] с.169.

2.6. Прямокутний потенціал скінченної глибини в теорії Дірака. Парадокс Клейна.

- Для потенціалу

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < -a, x > a; \\ -V_0 & -a < x < a, \end{cases}$$

де $a = \text{const}$ проводимо аналіз можливих станів електрона для різних значень енергії $|E| > mc^2$ та $|E| < mc^2$, де mc^2 – енергія спокою електрона. Визначаємо області де імпульс p є дійсним;

2. Отримання системи рівнянь на коефіцієнти хвильових функцій зліва ($x < -a$) і справа ($x > a$) від потенціальної ями.
3. Виведення рівняння для спектру енергії для зв'язаних станів при енергії електрона $V_0 < E < mc^2$ та $-a < x < a$;
4. Визначення коефіцієнтів проходження та відбиття для електронів та позитронів при значеннях енергій $|E| > mc^2$. Пояснення суті парадоксу Клейна.

Домашнє завдання:

1. Знайти спектр енергій зв'язаних станів у потенціальній ямі для електрона з енергією $mc^2 - V_0 < E < mc^2$;
2. Проаналізувати залежність коефіцієнтів проходження та відбиття для позитронів від значення параметра V_0 при $V_0 > 2mc^2$.

Матеріали для підготовки: W.Greiner [10] с.59 с.112.

2.7. Частинка з півцілим спіном у постійному магнітному полі. Рівні Ландау.

1. Отримання вигляду рівняння Паулі для частинки у зовнішньому полі. Для конфігурації магнітного поля яке задається векторним потенціалом $\vec{A} = \{0, 0, -yH\}$, де H - напруженість магнітного поля;
2. Аналіз операторів Гамільтоніана, побудова хвильової функції, зведення отриманого рівняння до осциляторного;
3. Аналіз спектру частинки, кратність виродження рівнів.

Домашнє завдання:

Для класичного (не квантового) поля розрахувати координати центру (x_0, y_0) навколо якого обертається частинка у постійному магнітному полі. Вважаючи отримані x_0 та y_0 операторами знайти чи будуть відповідні величини змінюватись у часі. Вказати чи можуть обидві координати бути визначені одночасно?

Матеріали для підготовки: Л.Д. Ландау [21] с.534, А.М. Федорченко [8] с.188.

2.8. Частинка з півцілим спіном у змінному магнітному полі.

1. Розділення спінових та координатних змінних. Використання канонічного перетворення для виокремлення спінового рівняння;
2. Отримання системи рівнянь для часової залежності компонент спінора для частинки у змінному магнітному полі

$$\vec{H} = \{H_1 \cos \omega t, H_1 \sin \omega t, H_0\},$$

де H_0 та H_1 – напруженості магнітного поля.

Домашнє завдання:

Для початкових умов коли спін частинки направлений вздовж осі z розрахувати час перевертання спіну у протилежному напрямку. Вказати частоту зовнішнього поля ω необхідну для такого повороту.

Матеріали для підготовки: А.М. Федорченко [8] с.198.

3

Квантування електромагнітного поля та його взаємодія з атомом.

3.1. Ефект Казиміра.

1. Отримання виразу для векторного потенціалу \vec{A} через оператори народження та знищення фотонів. Квантування електромагнітного поля;
2. Отримання сили взаємодії між заземленими точками у вакуумі враховуючи квантову природу електромагнітного поля. (Одно-вимірний ефект Казиміра);
3. Постановка задачі у двовимірному та тривимірному просторі.

Домашнє завдання: Розрахувати силу взаємодії між заземленими пластинами у двовимірному та тривимірному випадках.

Матеріали для підготовки: І.О. Вакарчук [1] с.497.

3.2. Теорія випромінювання та поглинання світла. Правила відбору.

1. Отримання виразів для інтенсивностей випромінювання і поглинання світла дворівневим атомом;
2. Розрахунок матричних елементів \vec{p}_{12} у дипольному наближенні. Приклади правил відбору для лінійного одномірного осцилятора та атома водню для лінійної поляризації світла.

Домашнє завдання:

1. Довести, що

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 \alpha \tau}{\pi \alpha^2 \tau} = \delta(\alpha);$$

2. Розрахувати правила відбору для атома водню при круговій поляризації світла;

3. Знайти правила відбору для електричного квадрупольного та магнітного дипольного випромінювання у атомі водню.

Матеріали для підготовки: І.О. Вакарчук [1] с.504, А. Мессиа [7] с.503, М.О. Скаллі [13] с.160.

3.3. Квантова теорія дисперсії світла.

1. Отримання виразу для середнього значення дипольного моменту $\langle n|d|n \rangle$ атома у n -тому стані у слабкому електричному полі $A = A_0 e^{i\omega t} + A_0 e^{-i\omega t}$ використовуючи перший порядок нестационарної теорії збурень для розрахунку хвильових функцій:

$$\Psi_n(r, t) = \Psi_n^{(0)}(r, t) + \sum_{k(k \neq n)} C_{kn}^{(1)} \Psi_k^{(0)}(r, t);$$

$$C_{kn}^{(1)} = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t V_{kn} \exp[i\omega_{kn}t] dt;$$

де

$$V_{kn} = -\frac{e}{mc} \langle k | \vec{A} \vec{p} | n \rangle, \quad \omega_{kn} = \frac{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}}{\hbar}$$

2. Отримання залежності показника заломлення n від частоти хвилі світла ω для ізотропного однорідного середовища

$$n^2 = 1 + \frac{4\pi e^2 N}{mV} \sum_k \frac{f_{kn}}{\omega_{kn}^2 - \omega^2},$$

де $f_{kn} = \frac{2m\omega_{kn}}{\hbar} |x_{kn}|^2$ – сила осцилятора, N – кількість атомів маси m у об'ємі V , e – заряд електрона.

Домашнє завдання:

Довести правило сум для сили осцилятора $\sum_k f_{kn} = 1$.

Матеріали для підготовки: І.О. Вакарчук [1] с.545, А. Мессиа [7] с.477, А.М. Федорченко [8] с.130.

3.4. Теорія Фотоефекту.

Отримання диференційного перерізу розсіяння електрона з основного стану атома водню через фотоефект враховуючи правило Фермі для ймовірностей переходів електронів у одиницю часу $\omega_{i \rightarrow f}$.

Домашнє завдання:

1. Розрахувати повний переріз фотоефекту для енергій фотона $\hbar\omega \geq I$ та $\hbar\omega \leq I$, де I – робота виходу електрона.
2. Розрахувати та проаналізувати кількість поглинутої енергії через фотоефект.

Матеріали для підготовки: І.О. Вакарчук [1] с.557, А. Мессіа [7] с.483, А.М. Федорченко [8] с.115.

3.5. Ширина спектральних ліній

Отримання диференційного перерізу розсіяння електрона з основного стану атома водню через фотоефект враховуючи правило Фермі для ймовірностей переходів електронів у одиницю часу $\omega_{i \rightarrow f}$.

Домашнє завдання:

1. Розрахувати повний переріз фотоефекту для енергій фотона $\hbar\omega \geq I$ та $\hbar\omega \leq I$, де I – робота виходу електрона.
2. Розрахувати та проаналізувати кількість поглинутої енергії через фотоефект.

Матеріали для підготовки: І.О. Вакарчук [1] с.532, А. Мессіа [7] с.470.

4

Елементи теорії розсіяння.

4.1. Теорія пружного розсіяння.

Отримання функції Гріна розсіяної частинки у Борнівському наближенні.

Домашнє завдання: Знайти у борнівському наближенні диференціальний та повний переріз розсіяння у полі

$$a) \quad U(r) = g^2 \frac{e^{-\alpha r}}{r},$$

$$b) \quad U(r) = U_0 e^{-\alpha^2 r^2}.$$

Матеріали для підготовки: І.О. Вакарчук [1] с.817, А.М. Федорченко [8] с.137, А. Мессіа [7] с.292.

4.2. Теорія непружного розсіяння.

Отримання диференційного ефективного перерізу непружного розсіяння для атома водню, якщо в результаті зіткнення із швидким електроном атом переходить із стану $1s$ у стан $2s$.

Домашнє завдання: Розрахувати переріз непружного розсіяння швидкого електрону із збудженням атома водню зі стану $1s$ у стан $2p$.

Матеріали для підготовки: І.О. Вакарчук [1] с.840, А.М. Федорченко [8] с.143.

5

Багатоелектронні задачі квантової механіки.

5.1. Квантова механіка багатьох частинок. Атом гелію.

1. Отримання конфігурації хвильових функцій для основного стану двочастинкової ферміонної системи. Отримання власного значення оператора спіну \hat{S} шляхом обчислення власних значень оператора \hat{S}_z та \hat{S}^2 ;
2. Отримання енергії іонізації атома гелію з використанням стаціонарної теорії збурень;
3. Отримання енергії іонізації атома гелію з використанням варіаційного методу Рітца; Аналіз збуджених станів атома гелію. Ортогелій та паргелій.
4. Отримання виразу для енергії першого збудженого стану атома гелію у першому порядку теорії збурень. Ортогелій і паргелій.

Домашнє завдання: Розрахувати кулонівський та обмінний інтеграли у виразі для енергії першого збудженого стану атома гелію.

Матеріали для підготовки: І.О. Вакарчук [1] с.651, А.М. Федорченко [8] с.206.

5.2. Енергія іонізації йону водню.

1. Розрахунок енергії іонізації для основного стану йона водню на основі теорії збурень;
2. Розрахунок енергії іонізації для основного стану йона водню на основі варіаційного методу Рітца з одним варіаційним параметром;
3. Отримання виразу для енергії іонізації для основного стану йона водню на основі варіаційного методу Рітца з двома варіаційними параметрами.

Домашнє завдання: Показати на основі виразу для енергії з двома варіаційними параметрами, що врахування екранування заряду ядра одним з електронів вдається отримати позитивне значення енергії іонізації. *Матеріали для підготовки:* І.О. Вакарчук [1] с.681.

5.3. Метод Гартрі-Фока. Наближення Томаса-Фермі.

Проводиться аналіз фізичних параметрів багатоелектронних атомів на основі наближених багаточастинкових методів:

1. Метод Гартрі-Фока;
2. Наближення Томаса-Фермі;
3. Адіабатичне наближення.

Домашнє завдання:

1. Виконати технічні розрахунки для методів викладених на практичному занятті.
2. Отримати хвильові функції заплутаних станів для тричастинкової системи.

Матеріали для підготовки: І.О. Вакарчук [1] с.686-690.

Додаткові завдання з квантової механіки підвищеної складності.

1. **Ефект Штарка.** Поясніть, чому у воднеподібних атомах спостерігається лінійний ефект Штарка, а у атома натрію – тільки квадратичний.
2. **Атом тритію.** Електрон знаходиться в основному стані атома тритію ${}^3\text{H}$. Ядерна реакція змінює ядра на аналогічні до атома гелію ${}^3\text{He}$.
 - (а) Розрахуйте ймовірність того, що електрон лишиться в основному стані атома ${}^3\text{He}$.
 - (б) Яка ймовірність того, що електрон стане вільним?
3. **Нестаціонарне магнітне збурення.** Атом водню спочатку знаходиться у основному стані з повним кутовим моментом $J = L + S = 0$. Цей стан відрізняється від стану з $J = 1$ малою різницею енергій ΔE . На атом починає діяти слабе магнітне поле, що направлене вздовж осі z , що дається функцією

$$B_z(t) = \begin{cases} 0, & \text{при } t < 0, \\ B_0 e^{-\gamma t}, & \text{при } t > 0, \end{cases} \quad (5.1)$$

де B_0 та γ константи.

- (а) Напишіть ефективний гамільтоніан взаємодії атома з магнітним полем. Поясніть, чому можна знехтувати взаємодією протона з магнітним полем.
 - (б) Розрахуйте ймовірність, що у далекому майбутньому, коли поле повністю зникне, атом буде знаходитись у стані з $J = 1$. При розв'язку задачі не розглядайте можливість випромінення фотонів атомом.
4. **Протони у магнітному полі.** Протони з магнітним моментом μ знаходяться у магнітному полі $\vec{B} = (B_0 \cos \omega t, B_0 \sin \omega t, B_z)$, де B_z та B_0 – константи. В момент часу $t = 0$ усі протони поляризовані в напрямку осі z .
 - (а) Яке значення частоти ω буде резонансним, якщо $B_0 \ll B_z$?
 - (б) Яка ймовірність перевероту спіну протона в момент часу t , якщо $B_z \ll B_0$?
 5. **Оптична теорема.** Розглянемо частинку, що летить з нескінченності вздовж осі z і пружньо розсіюється на деякому центрально-симетричному потенціалі $U(r)$, що достатньо швидко спадає з

відстанню. Щоб знайти хвильову функцію цієї частинки, спочатку дослідимо загальний розв'язок рівняння Шредінгера. Його можна шукати у вигляді розкладу за поліномами Лежандра:

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(\cos \theta) R_{kl}(r), \quad (5.2)$$

де A_l — довільні коефіцієнти, а функції $R_{kl}(r)$ визначаються радіальним рівнянням Шредінгера:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_{kl}}{dr} \right) + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} U(r) \right) R_{kl} = 0 \quad (5.3)$$

- (а) Знайдіть розв'язок цього рівняння для випадку $U(r) = 0$ та переконайтесь, що асимптотика при $r \rightarrow \infty$ дається виразом:

$$R_{kl} \approx \frac{2}{r} \sin \left(kr - \frac{l\pi}{2} \right) \quad (5.4)$$

- (б) Обґрунтуйте, що увімкнення короткодіючого потенціалу $U(r)$ модифікує асимптотику наступним чином:

$$R_{kl} \approx \frac{2}{r} \sin \left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right). \quad (5.5)$$

Величини δ_l називаються *фазою розсіювання*.

З іншого боку, хвильова функція частинки при розсіянні повинна мати вигляд плоскої хвилі та сферичної хвилі, що розходить-ся,

$$\Psi(\vec{r}) \approx e^{ikz} + \frac{f(\theta)}{r} e^{ikr}. \quad (5.6)$$

Функція $f(\theta)$ називається *амплітудою розсіювання*.

- (а) Користуючись розкладом плоскої хвилі за поліномами Лежандра

$$e^{ikz} = \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) \left((-1)^{l+1} e^{-ikr} + e^{ikr} \right),$$

доведіть, що асимптотика хвильової функції Ψ має вигляд

$$\Psi \simeq \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) \left((-1)^{l+1} e^{-ikr} + e^{i\delta_l} e^{ikr} \right). \quad (5.7)$$

Знайдіть зв'язок між амплітудою розсіяння $f(\theta)$ та фазами розсіяння δ_l .

Переріз розсіяння визначається наступною формулою:

$$\sigma = \int |f(\theta)|^2 d\Omega.$$

- (а) Користуючись знайденим вище зв'язком між амплітудою та фазами розсіяння доведіть *оптичну теорему*:

$$\text{Im}f(0) = \frac{k}{4\pi} \sigma.$$

6. **Тривимірний дельта-потенціал.** Частинка маси m взаємодіє з тривимірним сферично симетричним потенціалом $V(r) = -C\delta(r-a)$, де C та a є достатніми константами.

- (а) Знайдіть мінімальне значення C для якого існує зв'язаний стан.
 (б) Розгляньте експеримент з розсіяння в якому частинка налітає на потенціал з малою швидкістю. Розрахуйте переріз розсіяння і кутовий розподіл у цьому наближенні.

7. **Розсіяння на сферичній прямокутній ямі.** Розрахуйте переріз розсіяння низькоенергетичної частинки маси m на потенціалі

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & \text{при } r < a, \\ 0, & \text{при } r > a, \end{cases} \quad (5.8)$$

де $V_0 > 0$. Результат порівняйте з Борнівським наближенням.

8. **Розсіяння у потенціалі Пешля-Теллера.** Частинка маси m розсіюється на центральному потенціалі

$$V(r) = \frac{\hbar^2}{ma^2} \frac{1}{\cosh^2(r/a)}, \quad (5.9)$$

де a — константа розмірності довжини. Розрахуйте внесок s -хвилі до повного перерізу розсіяння для енергії E .

9. **Дві частинки у нескінченній ямі.** Дві неідентичні частинки однакової маси m знаходяться у нескінченній потенціальній ямі шириною L .

- (а) Запишіть хвильові функції трьох перших станів з найменшою енергією (для яких щонайбільше одна частинка перебуває у збудженому стані), якщо частинки не взаємодіють між собою.
- (б) Нехай потенціал взаємодії між частинками $V_{12} = \lambda \delta(x_1 - x_2)$. Знайдіть поправки до енергій цих станів у першому порядку теорії збурень.
10. **Магнітна сприйнятливність атома гелію.** Оцінити магнітну сприйнятливність атома гелію у основному стані. Він є парамагнетиком чи діамагнетиком?
11. **Молекула порфірину.** Порфіринове кільце це молекула, яка міститься у хлорофілі, гемоглобіні та інших важливих речовинах. Приблизний спектр молекули можна отримати якщо змодлювати її як 18 вільних ідентичних електронів що знаходяться на кільці радіуса $R = 4 \text{ \AA}$.
- (а) Запишіть хвильові функції даної багатоелектронної системи з певними значенням енергії.
- (б) Знайдіть найнижчу енергію збудження і відповідне чисельне значення довжини хвилі.
12. **Вектор Рунге-Ленца.** Для кулонівського потенціалу $V(r) = -\frac{e^2}{r}$ в класичній механіці існує інтеграл руху:

$$\vec{A} = \frac{1}{m} [\vec{p} \times \vec{L}] - \frac{e^2 \vec{q}}{q}, \quad (5.10)$$

де m – маса електрона, а \vec{p} , \vec{q} та \vec{L} – імпульс, координата та момент імпульсу відповідно.

- (а) Знайдіть відповідний ермітовий оператор у квантовій механіці. Перевірте, що він зберігається для гамільтоніану з кулонівським потенціалом;
- (б) Запишіть інший оператор симетрії даного гамільтоніану, окрім тривимірних поворотів;
- (с) Доведіть наступні вирази:

$$\hat{A}^2 = e^4 + \frac{2}{m} [\hat{L}^2 + \hbar^2] \hat{H} \quad (5.11)$$

$$(\hat{A} \cdot \hat{L}) = (\hat{L} \cdot \hat{A}) = 0$$

- (d) Знайдіть такий оператор \hat{J} , що $[\hat{H}, \hat{J}] = 0$ і вираз (5.11) переписується як співвідношення тільки на \hat{J} та \hat{H} ;
- (e) Таким чином, покажіть, що власні значення гамільтоніану залежать лише від одного квантового числа.

13. **Нерівність Белла** *Теорії з прихованими параметрами* – це альтернативні до квантової механіки теорії, у яких припускається, що ймовірнісна природа квантового вимірювання пов'язана зі складною, але класичною динамікою прихованих степенів вільності. У цих теоріях квантовий стан можна ефективно описувати класичним розподілом імовірності $P(\mathcal{O}_1, \dots, \mathcal{O}_n)$, де \mathcal{O}_i – релевантні для даного дослідження спостережувані.

Белл (1964) запропонував наступний дослід, що дозволяє однозначно перевірити дієздатність таких теорій з прихованими параметрами. Розглянемо дві квантові частинки зі спіном $\frac{1}{2}$ у синглетному стані. Ці частинки розділяють та направляють до ізолюваних між собою камер. Нехай у камері 1 вимірюється проекція спіну на вісь \vec{a}_1 . Результат вимірювання $\pm \frac{1}{2}$ (в одиницях сталої Планка \hbar) назвемо A_1 . У другій камері вимірюється проекція спіну A_2 на вісь \vec{a}_2 . Проводячи повторно цей дослід, отримано деяке середнє значення добутку $\langle A_1 A_2 \rangle$.

- (a) Допускаючи усі можливі напрямки \vec{a}_1, \vec{a}_2 , у яких межах може змінюватись величина $\langle A_1 A_2 \rangle$?

Тепер розглянемо величину

$$R = |\langle A_1 A_2 \rangle + \langle B_1 A_2 \rangle + \langle B_1 B_2 \rangle - \langle A_1 B_2 \rangle|,$$

де B_1 та B_2 відповідають деяким новим осям \vec{b}_1, \vec{b}_2 (індекси 1, 2 відповідають камерам 1, 2). Припустимо, що дана система описується теорією з прихованими параметрами. В такому разі наш дослід має повністю описуватись деяким розподілом імовірностей $P = P(A_1, A_2, B_1, B_2)$.

- (a) Допускаючи довільний розподіл P та напрямки осей $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{b}_1$ та \vec{b}_2 – яке максимальне значення може набувати величина R ? Відповідне обмеження називається *нерівністю Белла*.

Доведемо, що квантова механіка передбачає порушення цієї нерівності. Для простоти, розглянемо вісі $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{b}_1$ та \vec{b}_2 , що лежать у одній площині.

- (a) Знайдіть власні стани матриці $(\vec{n} \cdot \hat{\sigma})$ проекції спіну на вісь \vec{n} , скориставшись сферичними координатами для \vec{n} . Ско-

ристайтесь результатом, щоб виразити величину R через відносні кути між осями. Знайдіть хоча б одне розташування осей, при якому можна очікувати порушення нерівності Белла.

14. **Стохастичний осцилятор.** Частинка з масою m знаходиться у одновимірному гармонічному осциляторному потенціалі $V_1 = \frac{1}{2}kx^2$.

- (а) У початковий момент частинка знаходиться у основному стані. Константа k раптово подвоюється, тобто новий потенціал стає рівним $V_2 = kx^2$, після чого енергія частинки вимірюється. Яка ймовірність того, що частинка опиниться у основному стані нового потенціалу V_2 ?
- (б) Розглянемо інший експеримент, де константа k у потенціалі раптово подвоюється так само як і у попередньому пункті, але енергія частинки не вимірюється. Замість цього через час T після переходу до потенціалу V_2 відбувається зворотна зміна потенціалу до V_1 . Знайдіть такі моменти часу T , що система буде знайдена у основному стані для V_1 з ймовірністю 100%.
- (с) Чи будуть існувати такі моменти часу T з попереднього пункту, якщо V_2 — деякий довільний потенціал? Якщо ні, то яким умовам повинен задовольняти потенціал V_2 для існування таких T ?

15. **Осциляції нейтральних K -мезонів.** У цій задачі ми будемо розглядати нестабільні частинки. Для їх спрощеного опису ми будемо використовувати неермітові гамільтоніани $H^+ \neq H$.

- (а) Розглянемо частинку у стані спокою, що описується гамільтоніаном $\hat{H} = M - \frac{i}{2}\Gamma$, де M , Γ — дійсні додатні числа. Покажіть що ймовірність спостереження частинки підкорюється закону радіоактивного розпаду з часом життя \hbar/Γ . Величину Γ називають *шириною розпаду*.

У природі існує 2 нейтральні K -мезони $|K^0\rangle$ та $|\bar{K}^0\rangle$, що мають кварковий склад $d\bar{s}$ та $\bar{d}s$ відповідно. Відомо, що ці стани переходять один в одного під дією СР симетрії, яка є симетрією квантової хромодинаміки. Будемо записувати хвильову функцію

системи як

$$|\Psi\rangle = a|K^0\rangle + b|\bar{K}^0\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}. \quad (5.12)$$

У цьому представленні гамільтоніан K -мезонів у стані спокою має вигляд

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} M_K - \frac{i}{2}\Gamma_K & 0 \\ 0 & M_K - \frac{i}{2}\Gamma_K \end{pmatrix}. \quad (5.13)$$

Стан $|K^0\rangle$ може переходити у стан $|\bar{K}^0\rangle$ через слабку взаємодію, що ми будемо описувати за допомогою оператора \hat{V}_W . Припустимо, що слабка взаємодія СР-інваріантна (це не зовсім так, але порушення СР інваріантності дуже мале і ми його розглядати далі не будемо).

(а) Покажіть, що

$$\langle K^0|\hat{V}_W|\bar{K}^0\rangle = \langle \bar{K}^0|\hat{V}_W|K^0\rangle = \Delta, \quad (5.14)$$

де Δ деяке комплексне число. Тоді повний вираз для гамільтоніану вільних K -мезонів

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} M_K - \frac{i}{2}\Gamma_K & \Delta \\ \Delta & M_K - \frac{i}{2}\Gamma_K \end{pmatrix}. \quad (5.15)$$

(б) Діагоналізуйте цей гамільтоніан. Покажіть що власні стани цього гамільтоніану є власними станами оператора СР симетрії з власними значеннями ± 1 .

СР-парний стан називають $|K_S^0\rangle$, а СР-непарний $|K_L^0\rangle$. Їм відповідають частинки з певними масами m_S , m_L та ширинами розпаду Γ_S , Γ_L .

(а) Пов'яжіть між собою параметри нашої моделі M_K , Γ_K , Δ з фізично спостережуваними властивостями частинок.

Нехай у початковий момент часу утворюється нерухома частинка у стані $\Psi(0) = |K^0\rangle$.

(а) Знайдіть ймовірність $P(t)$ детектування частинки у стані $|\bar{K}^0\rangle$ у момент часу t . Відповідь запишіть через спостережувані параметри системи. У який час t ця ймовірність максимальна і чому вона рівна?

ЛІТЕРАТУРА

1. *Вакарчук І.О.* Квантова механіка. Львів.: ЛНУ ім. Івана Франка, 2007.-848 с.
2. *И.В. Копыткин, А.С. Корнев, Т.А. Чуракова* Задачи по квантовой механике: учебное пособие для вузов. Часть 3. Воронеж, 2008.-75 с.
3. *А.Б. Мигдал, В.П. Крайнов* Приближенные методы квантовой механики. Москва: Наука, 1966.- 152 с.
4. *А.В. Шорохов, М.А. Пятаев* Введение в квантовую теорию. Саранск, 2010.-63 с.
5. *А.В. Поваров* Квантовая механика Т2. Ярославль, 2010.-18 с.
6. *Good, R. H.* Properties of the Dirac Matrices. Rev. Mod. Phys. 27, 2 (1955).
7. *А. Мессиа* Повышающий и понижающий операторы в квантовой механике. Москва, 1979.-583 с.
8. *Федорченко А.М.* Основы квантовой механики. К. Вища школа, 1979.- 271 с.
9. *Блохинцев Д.И.* Основы квантовой механики. М. Наука, 1976.-664 с.
10. *Walter Greiner* Quantum electrodynamics of strong fields. Berlin, Springer 1985.
11. *Бьёркен Дж. Д., Дрелл С. Д.* Релятивистская квантовая теория. М. Наука, 1978. - 297 с.
12. *Пескин М., Шредер Д.* Введение в квантовую теорию поля. — Ижевск: РХД, 2002. — 784 с.
13. *Скалли М. О., Зубайри М. С.* Квантовая оптика. — М: Физматлит, 2003. — 512 с.
14. *Дирак П. А. М.* Принципы квантовой механики. — М.: Наука, 1979. — 440 с.

15. *Дирак П. А. М.* Релятивистское волновое уравнение электрона (рус.) // Успехи физических наук. — 1979. — Т. 129, вып. 4. — С. 681–691.
16. *Дайсон Ф.* Релятивистская квантовая механика. — Ижевск: РХД, 2009. — 248 с.
17. *Шифф Л.* Квантовая механика. — М.: ИЛ, 1959. — 476 с.
18. *Shankar R.* Principles of Quantum Mechanics. — Plenum, 1994.
19. *Thaller B.* The Dirac Equation. — Springer, 1992.
20. *Forshaw, J. R.; Smith, A. G.* Dynamics and Relativity. Manchester Physics Series. John Wiley and Sons Ltd, 2009. pp. 124–126.
21. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теория поля. — Издание 7-е, исправленное. — М.: Наука, 1988. — 512 с.