Задачі до курсу квантової механіки

Андрій Жугаєвич (azh@ukr.net) 13 жовтня 2018 р.

§1. Математичний апарат квантової механіки

- 1. (3) Знайти оператори, спряжені до операторів $x, \frac{d}{dx}, x \frac{d}{dx}, \frac{d^n}{dx^n}, \exp\left(a \frac{d}{dx}\right)$. 2. (5) Знайти комутатори: a) $[r_i, p_j], [p_i, p_j];$ б) $[L_i, L_j], [r_i, L_j], [p_i, L_j], [L^2, \mathbf{L}], [p^2, \mathbf{L}];$ в) $[U(\mathbf{r}), \mathbf{p}],$ $[U(r), \boldsymbol{L}].$
- 3. (5) Знайти власні значення і власні функції операторів імпульсу і кінетичної енергії.
- 4. (10) Показати, що оператор трансляції має вигляд $\exp\left(a\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)$. Довести його унітарність. Знайти власні значення і власні функції. Узагальнити на багатовимірний випадок.
- 5. (5) Нехай (E,ψ) власний елемент оператора H, який залежить від параметра λ . Показати, що $\partial E/\partial \lambda =$ $\langle \psi | \partial H / \partial \lambda | \psi \rangle$.

§3. Задачі загального характеру

- 1. (10) Довести, що для гамільтоніану $H = \frac{p^2}{2m} + U(\boldsymbol{x})$ виконується співвідношення $\langle n|\boldsymbol{p}|n'\rangle = im\omega_{nn'}\langle n|\boldsymbol{x}|n'\rangle$. (10) Показати, що сила з якою частинка діє на вертикальну стінку, розташовану в деякій точці, дорівнює $|\psi|^2 \delta U$, де δU – стрибок потенціалу в цій точці. Показати також, що у випадку нескінченно високої стінки цей вираз зведеться до $\frac{\hbar^2}{2m}\psi'^2$.
- 3. (3) Показати, що потік імовірності для частинки в стані з хвильовою функцією $A\psi_1+B\overline{\psi_1}$ є сумою двох протилежних потоків.
- 4. (3) Показати, що в одновимірному випадку потік імовірності для частинки в стаціонарному стані не залежить від координати.
- 5. (5) Оцінити характерні енергії електрона в атомі за розміром останнього.
- 6. (20) Для двох заданих станів ψ_i і ψ_f знайти незалежний від часу гамільтоніан, який переводить один стан у другий за найшвидший час, за умови, що різниця між найбільшим і найменшим власними значеннями гамільтоніану дорівнює $\hbar\omega$.

§4. Рух вільної частинки

- 1. (5) Для частинки у стані з хвильовою функцією $A \exp \left(-x^2/a^2 + ikx\right)$ знайти: а) середні і дисперсії координати та імпульсу; б) густину і потік імовірності; в) розподіл імпульсу.
- (5) Для частинки у стані з хвильовою функцією $A \exp\left(-\frac{x^2}{a^2+iab}+ikx\right)$ перевірити співвідношення невизначеностей для координати і імпульсу.
- 3. (15) Для частинки у стані з хвильовою функцією $Ae^{-x^2/a^2}\cos kx$ знайти середні і дисперсії координати та імпульсу.
- 4. (20) Знайти пропагатор для вільної частинки.
- 5. (20) Дослідити еволюцію вільної частинки з хвильовою функцією $A \exp\left(-x^2/a^2 + \mathrm{i}kx\right)$ в початковий момент часу.
- 6. (5) Знайти імовірність того, що вільна частинка з початковою хвильовою функцією $A \exp(-x^2/a^2 + ikx)$ полетить вправо.
- 7. (5) Навести приклад хвильової функції вільної частинки, що повністю зміщується вправо (тобто частинка з імовірністю 1 полетить вправо).
- 8. (20) Дослідити еволюцію вільної частинки з хвильовою функцією $A \exp\left(-\frac{x^2}{a^2+\mathrm{i}ab}+\mathrm{i}kx\right)$ в початковий момент часу.
- 9. (60) Знайти пропагатор для частинки в сталому однорідному полі U(x) = -Fx.
- 10. (20) Частинка рухається в сталому однорідному полі $U(\boldsymbol{x}) = -\boldsymbol{F}\boldsymbol{x}$. Показати, що якщо $\psi_0(t,\boldsymbol{x})$ розв'язок задачі з нульовою силою, то

$$\psi_0\left(t, \boldsymbol{x} - \frac{\hbar \boldsymbol{k}t}{m} - \frac{\boldsymbol{F}t^2}{2m}\right) \exp\left[\mathrm{i}\left(\boldsymbol{k} + \frac{\boldsymbol{F}t}{\hbar}\right)\left(\boldsymbol{x} - \frac{\hbar \boldsymbol{k}t}{2m}\right) - \mathrm{i}\frac{F^2t^3}{6m\hbar}\right]$$

- розв'язок задачі з ненульовою силою і видозміненою початковою умовою $\psi_0(0, \boldsymbol{x}) \mathrm{e}^{\mathrm{i} \boldsymbol{k} \boldsymbol{x}}$.
- 11. (30) Дослідити рух частинки в сталому однорідному полі з хвильовою функцією $A \exp\left(-r^2/a^2 + \mathrm{i} \boldsymbol{k} \boldsymbol{x}\right)$ в початковий момент часу.
- 12. (10) Узагальнюючи приклад гаусового пакету, з'ясувати умову, за якої визначена траєкторія квантової частинки. Розглянути приклад молекул повітря: з якою просторовою точністю можна говорити про траєкторію їх руху?
- 13. (2) Оцінити довжину хвилі де Бройля електрона, який має а) швидкість 1 км/с; б) енергію 1 еВ.

§5. Одновимірне рівняння Шредингера: спектр

- 1. (5-15) Для частинки в потенціальному ящику знайти $\psi(t,x)$, якщо: а) $\psi(0,x) = A\left(\sin\frac{\pi x}{a} + \sin\frac{2\pi x}{a}\right)$; б) $\psi(0,x) = A(a-|a-2x|);$ в) $\psi(0,x) = Ax(a-x);$ г) $\psi(0,x) = A\sqrt{\frac{2}{a}}\sin^{2m+1}\frac{\pi x}{a}.$
- 2. (5) Обчислити матричні елементи оператора координати для потенціального ящика
- 3. (3) Знайти дисперсію координати частинки в потенціальному ящику.
- 4. (5) Знайти розподіл імпульсу частинки в потенціальному ящику.
- а) Оцінити розміри системи (наприклад, потенціальна яма), 5. (8) Ефекти розмірного квантування: при яких спектр електрона можна вважати неперервним. б) Оцінити поперечні розміри планарної структури SiO₂–Si–SiO₂, при яких рух електрона можна вважати двовимірним. в) Оцінити поперечні розміри планарної структури SiO_2 - SiO_2 , при яких висоту бар'єру $Si-SiO_2$ можна вважати нескінчен-
- 6. (10) Для електрона в потенціальній ямі ширини 1 нм і глибини 1 eB обчислити дискретні рівні енергії.
- 7. (20) Для електрона в полі двох потенціальних ям ширини 1 нм і глибини 1 еВ, розділених проміжком 1 нм, обчислити розщеплення найнижчої пари рівнів енергії, а також силу притягання між ямами.
- 8. (50) Потенціал дорівнює $-V_1$ на відрізку $(-a_1-b,-b), -V_2$ на відрізку $(b,b+a_2),$ нулеві на відрізку (-b,b) і нескінченний у всіх інших точках, причому $V_1 > V_2 > 0$ (дві відокремлені одна від одної ями). У початковий момент часу частинка знаходиться на дні лівої ями. Описати еволюцію цієї системи.
- 9. (5) Дослідити зв'язані стани частинки в дельта-ямі $U(x) = -\alpha \delta(x)$.
- 10. (10) Прямим інтегруванням перевірити ортонормованість власних функцій неперервного спектру для частинки в потенціалі $U(x) = \alpha \delta(x)$.
- 11. (15) Знайти функцію Гріна частинки в потенціалі $U(x) = \sum_i \alpha_i \delta(x a_i)$.
- 12. (30) Знайти пропагатор для частинки в дельта-потенціалі.
- 13. (50) Описати еволюцію частинки в потенціалі $U(x) = -\alpha \delta(x) \beta \delta(x-a)$, якщо в початковий момент часу частинка знаходиться в лівій ямі.
- 14. (10) Показати, що в багатовимірному випадку задача з дельта-потенціалом незмістовна.
- 15. (15) Для гармонічного осцилятора обчислити матричні елементи оператора координати і його степенів до четвертої включно.
- 16. (5) Знайти кінетичну енергію гармонічного осцилятора в стаціонарному стані.
- 17. (8) Для гармонічного осцилятора знайти розподіл імпульсу.
- 18. (2) Для основного стану гармонічного осцилятора обчислити значення хвильової функції в точці повороту класичної траекторії по відношенню до її максимального значення.
- 19. (5) Порівняти квантовий і класичний розподіли координати гармонічного осцилятора.
- 20. (5) Знайти спектр і власні функції гармонічного осцилятора в однорідному полі.
- 21. (15) Знайти енергію взаємодії двох осциляторів у дипольному наближенні.
- 22. (60) Знайти пропагатор гармонічного осцилятора.
- 23. (30) Дослідити еволюцію осцилятора з початковою хвильовою функцією $A \exp\left(-\alpha \xi^2 + i\kappa \xi\right)$, де $\xi =$ $x\sqrt{m\omega/\hbar}$.

Знайти і проаналізувати рівні енергії і власні функції дискретного спектру для частинки в заданому потенціалі:

- 24. (20) Півосцилятор $U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \frac{\alpha}{x^2}$. 25. (20) Трикутна яма $U(x) = \alpha |x|$.
- 26. (20) Півтрикутна яма $U(x)=\alpha |x|,\ x>0.$ 27. (20) $U(x)=-\frac{V}{\cosh^2\alpha x}.$ 28. (20) $U(x)=V(e^{-2\alpha x}-2e^{-\alpha x}).$

§6. Одновимірне рівняння Шредингера: проходження бар'єру

- 1. (5) Знайти глибину проникнення частинки в потенціальну стінку висоти W. Зробити оцінку для інтерфейсу Si–SiO₂.
- 2. (30) Розглянути загальну схему знаходження коефіцієнта проходження частинки через кусково-інтегровний потенціал.
- 3. (10) Показати, що для симетричного потенціалу амплітуда відбитої хвилі відновлюється за амплітудою хвилі, що пройшла.

Знайти коефіцієнт проходження для заданого потенціалу:

- 4. (10) Прямокутна потенціальна яма.
- 5. (5) $U(x) = \alpha \delta(x)$.
- 6. (5) $U(x) = \theta(x)W$.
- 7. (15) Потенціал дорівнює V при 0 < x < a, W < V при x > a і нулю в інших випадках.
- 8. (45) Модель холодної емісії електронів. Потенціал дорівнює W Fx при 0 < x < a, W Fa при x > a і нулю в інших випадках.
- 9. (15) Знайти імовірність проходження гаусового пакету через дельта-потенціал. Побудувати графік залежності цієї імовірності від ширини пакету при фіксованій енергії пакету.
- 10. (30) Вивести формулу для електронної енергії дефекта, що являє собою потенціал U, прямуючий до нуля на нескінченності. Двократно вироджені по спіну електрони не взаємодіють і заповнюють всі рівні з енергією нижче заданої. Відповідь узагальнити на випадок непараболічного закону дисперсії.

§7. Тривимірне рівняння Шредингера: спектр

- 1. (10-20) Знайти спектр і власні функції сферичного ротатора. Розглянути також багатовимірний випадок.
- 2. (5-15) Знайти гібридизовані атомні орбіталі, які відповідають таким координаціям центрального атома: а) лінійна; б) трикутна; в) тетраедрична; г) октаедрична; д) кубічна; е) знайти можливу гібридизацію для молекули P₄.
- 3. (5) Знайти спектр і власні функції сферичного потенціального ящика.
- 4. (10-20) Знайти спектр і власні функції сферичної потенціальної ями. Розглянути також багатовимірний випадок.
- 5. (30) Оцінити зверху і знизу рівні енергії та знайти їх кількість для гіперсферичної потенціальної ями.
- 6. (10) При якій глибині сферичної потенціальної ями вона матиме хоча б один зв'язаний стан і як результат залежить від розмірності ями?
- 7. (20) Для електрона у сферичній потенціальній ямі радіусу 1 нм і глибини 1 eB обчислити дискретні рівні енергії.
- 8. (10) Знайти спектр і власні функції циліндричної потенціальної ями (циліндр нескінченної довжини).
- 9. (10) Знайти спектр і власні функції потенціального ящика у формі циліндра (скінченної довжини).
- 10. (15) Дослідити залежність енергії основного рівня від форми потенціального ящика при фіксованому об'ємі на прикладі кубу, кулі і циліндра. Зробити висновки.
- 11. (20-60) Знайти спектр і власні функції для частинки в потенціалі $U(r) = -\alpha r^{-1} + \beta r^{-2}$. Розглянути також багатовимірний випадок.
- 12. (20) Знайти спектр і власні функції сферично-симетричного напівосцилятора: $U(r) = \frac{m\omega^2 r^2}{2} + \frac{\alpha}{r^2}$.
- 13. (5) Знайти середнє, дисперсію і найбільш імовірне значення відстані електрона до ядра в основному стані атома водню.
- 14. (10) Знайти середній радіус орбіти і його дисперсію для стаціонарних станів частинки в кулонівському потенціалі з заданими значеннями головного і орбітального квантових чисел.
- 15. (10) Знайти густину струму електрона в стаціонарному стані атома водню.
- 16. (10) Знайти долю потенціальної і кінетичної енергії радіального і обертального рухів для частинки в кулонівському потенціалі з заданими значеннями головного і орбітального квантових чисел.

- 17. (5) Знайти дипольний момент атома водню у стані $\psi = A(|200\rangle + |210\rangle)$.
- 18. (15) Знайти квадрупольний момент електрона в кулонівському потенціалі у стані $|nlm\rangle$.
- 19. (15) Знайти матричні елементи $\langle n, l | r | n, l-1 \rangle$ в кулонівському потенціалі.
- 20. (15) Знайти матричні елементи $\langle n, l | r^2 | n, l-2 \rangle$ в кулонівському потенціалі.
- 21. (–) Вивести рекурентні співвідношення для матричних елементів $\langle nl|r^s|nl'\rangle$ в кулонівському потенціалі.
- 22. (15) Розглянути найпростішу модель воднеподібної домішки у квантовій точці: знайти спектр і залежність енергії іонізації домішки від розміру квантової точки.
- 23. (10) Знайти спектр і власні функції частинки в рівнобедреному прямокутному трикутнику.

§8. Частинка в центральному полі: задача розсіяння

Знайти власні функції неперервного спектру:

- 1. (10) Вільна частинка у сферичних координатах.
- 2. (25) Кулонівський потенціал.

Знайти переріз розсіяння і побудувати графік $\sigma(E)$ для таких потенціалів:

- 3. (20) Абсолютно непроникна куля радіусу a.
- 4. (30) Сферична потенціальна яма радіусу a і глибини V.
- 5. (40) Кулонівський потенціал.

§9. Частинка в періодичному потенціалі

Знайти зонний спектр і власні функції. Вказати характер розташування зон і оцінити їх межі. Знайти ефективні маси:

- 1. (20-40) Прямокутний періодичний потенціал (модель Кроніга—Пенні), який на періоді 0 < x < a + b приймає значення -V при x < a і 0 при x > a.
- 2. (60) Потенціал в рівнянні Ламе.
- 3. (60) Потенціал в рівнянні Мат'є.
- 4. (10) Показати, що для прямозонного напівпровідника з вузькою забороненою зоною маси легких електронів і дірок пов'язазані співвідношенням $m_{\rm e}^{-1}-m_{\rm h}^{-1}\approx 2$.
- 5. (20) Нехай періодичний потенціал U "розсунули" в точці x_0 так, що $\tilde{U}(x) = U(x)$ при $x < x_0$, $\tilde{U}(x) = U(x-b)$ при $x > x_0 + b$, а на проміжку $(x_0, x_0 + b)$ потенціал "новий". Знайти рівняння для локалізованих на такій "дислокації" рівнів за відомими матрицею Коші \mathbf{M} на періоді $(x_0, x_0 + a)$ потенціалу U і матрицею Коші \mathbf{G} на проміжку $(x_0, x_0 + b)$. Окремо розглянути випадок малих b.
- 6. (20) Нехай періодичний потенціал U "розсунули" в точці x_0 так, що U(x) = U(x) при $x < x_0$ і U(x) = U(x-b) при $x > x_0$. Знайти рівняння для локалізованих на такій "дислокації" рівнів. Окремо розглянути випадок малих b.
- 7. (30) Знайти енергію рівнів, локалізованих на "дислокації" в моделі Кроніга-Пені.
- 8. (10-20) Узагальнюючи результати попередніх задач показати, що розподіл енергії локалізованих станів, пов'язаних з флуктуацією довжин міжатомних зв'язків, показниковий (Urbach tails). З'ясувати межі застосовності одержаних результатів.
- 9. (15) Знайти рівні енергії в модульованій подвоєним періодом моделі Кроніга–Пенні, тобто коли відстані між сусідніми дельта-потенціалами почергово змінюються, приймаючи значення $a \pm \delta a$.
- 10. (30) В модульованій подвоєним періодом гребінці Дірака "вилучили" один із дельта-потенціалів, а відстань між сусідами вилученого потенціалу поклали рівною a+b так, що при b=0 маємо "дислокацію" на пів-періода. Знайти енергію локалізованих на "дислокації" рівнів.

§12. Квазікласичне наближення

1. (15) Потенціал має в заданій точці розрив першого роду. Вказати умови квазікласичності в околі цієї точки і при виконанні цих умов зшити квазікласичні функції по обидва боки точки розриву.

- 2. (15) Нехай потенціал на нескінченності квазімонотонно прямує: а) до плюс нескінченності, б) до нуля (тут квазімонотонність означає, що функція затиснена між двома монотонними функціями з однаковими границями). Використовуючи квазікласичне наближення знайти головну асимптотику хвильової функції, вказати умови квазікласичного наближення, зробити висновки з точки зору локалізації хвильової функції.
- 3. (20) Нехай потенціал має вигляд $U(x) + \alpha \delta(x)$, де U симетричний одноямний потенціал. Записати рівняння на спектр в квазікласичному наближенні.

Знайти дискретний спектр одновимірної системи із заданим потенціалом в квазікласичному наближенні, порівняти з точним значенням спектру і зробити висновки:

- 4. (10) Гармонічний осцилятор. Знайти також хвильові функції.
- 5. (5) Частинка в однорідному полі на півпрямій.

- 5. (5) Частинка в однорідному поль.
 6. (10) $U = -\frac{V}{\cosh^2 \alpha x}$.
 7. (10) $U = V(e^{-2\alpha x} 2e^{-\alpha x})$.
 8. (15) $U = \frac{a^2}{\sin^2 \alpha x} + \frac{b^2}{\cos^2 \alpha x}$.
 9. (10) $U = -V \sin^2 \frac{\pi x}{a}$, 0 < x < a, розглянути лише випадок невеликих V.
- 10. (20) Потенціал Ленарда-Джонса. Знайти також кількість зв'язаних станів.

Знайти дискретний спектр частинки у заданому сферично-симетричному потенціалі в квазікласичному наближенні, вказати умови квазікласичного наближення, порівняти з точним значенням спектру і зробити висновки:

- 11. (10) Сферично-симетричний осцилятор.
- 12. (10) Сферично-симетричний напівосцилятор: $U = \frac{m\omega^2 r^2}{2} + \frac{\alpha}{\kappa^2}$.
- 13. (10) Кулонівський потенціал.

Знайти коефіцієнт прозорості бар'єру в квазікласичному наближенні для таких систем:

- 14. (5) Холодна емісія електронів з металу.
- 15. (10) α -розпад важких ядер.
- 16. (15) Частинка в двоямному потенціалі $U=\frac{m\omega^2}{8a^2}(x^2-a^2)^2$. Знайти в квазікласичному наближенні частоту переходів між основними станами в ямах. За яких умов на параметри системи задача змістовна і допустиме квазікласичне наближення?
- 17. (10) Знайти кількість зв'язаних станів у *d*-вимірному сферично симетричному спадаючому до нуля на нескінченності потенціалі.
- 18. (25) Знайти першу поправку до квазікласичної формули для кількості станів частинки в потенціальному ящику довільної форми і розмірності.

§13. Варіаційний метод

Оцінити відносну похибку варіаційного методу для основного стану наступних систем:

- 1. Потенціальний ящик, пробну хвильову функцію взяти у вигляді поліному другого степеня.
- 2. Кулонівський потенціал, пробну хвильову функцію взяти у вигляді гауссіану.

Варіаційним методом знайти енергію і хвильову функцію перших двох рівнів наступних систем:

- 3. (15) Ангармонічний осцилятор.
- 4. (15) Частинка в потенціалі $U(x)=\frac{m\omega^2}{2}x^2+\alpha x^6.$ 5. (30) Частинка в потенціалі $U(x)=\alpha|x|^n.$
- 6. (15) Частинка в трикутній ямі.
- 7. (15) Частинка в потенціалі $U(x) = -V \sin^2 \frac{\pi x}{a}, \, 0 < x < a,$ розглянути випадок великих V.
- 8. (30) Частинка в потенціалі $V\left(\frac{a^2}{r^2} 2\frac{a}{r}\right)$.
- 9. (20) Знайти енергію основного стану атому гелію без врахування спіну.
- 10. (15) Варіаційним методом знайти умову локалізації в потенціалі Юкави $U = -\alpha r^{-1} e^{-\lambda r}$.
- 11. (99) Полоса шириною 2r зігнута на кут 2θ в такий спосіб, що місце згину являє собою частину кільця з радіусами R_1 і R_2 , причому $R_2 - R_1 = 2r$. Дослідити локалізацію частинки на такій неоднорідності, якщо

потенціальні стінки полоси нескінченні. Розглянути також крайні випадки. Порівняти з результатами чисельного розрахунку.

§14. Стаціонарна теорія збурень

- 1. (15) Знайти перші дві поправки до рівнів енергії ангармонічного осцилятора, $V = \alpha x^3 + \beta x^4$.
- 2. (15) Розглянути наступну гіпотетичну модель атома літію: зовнішній (третій) електрон рухається в електричному полі ядра і двох спарених внутрішніх електронів. Хвильову функцію останніх взяти у вигляді хвильової функції основного рівня воднеподібного атома. Для зовнішнього електрона за незбурений потенціал прийняти повністю екранований внутрішніми електронами потенціал ядра, тобто e^2/r , а неповне екранування врахувати методом теорії збурень. Оцінити енергію основного стану зовнішнього електрона в першому порядку теорії збурень.
- 3. (25) Для двовимірного ізотропного осцилятора з частотою ω і з потенціалом збурення $V = \alpha x^2 y^2$ знайти поправки до енергії 0-, 1-, 2, 3-го рівнів в першому порядку теорії збурень та правильні хвильові функції нульового порядку, для основного рівня знайти також хвильову функцію в першому порядку і енергію в другому порядку теорії збурень.

§15. Нестаціонарна теорія збурень

- 1. (15) Для частинки в потенціальному ящику 1) знайти імовірності переходів в однорідному полі, прикладеному протягом проміжку часу T; 2) знайти імовірності переходів в однорідному полі, яке лінійно зростає на проміжку часу T до фіксованого значення; 3) знайти коефіцієнт поляризації.
- 2. (15) Знайти поляризовність атома водню в основному стані.

§20. Метод лінійної комбінації базисних функцій

- 1. (10) Знайти енергію основного стану ангармонічного осцилятора, потенціальна енергія якого в безрозмірних змінних має вигляд $\xi^2/2 + \xi^4$, з точністю до четвертого знаку. Який розмір базису треба при цьому взяти?
- 2. (20-40) Побудувати повний ортогональний тригонометричний базис для прямокутного трикутника. Для випадку співвідношення катетів 2 : 1 знайти енергію перших трьох рівнів з точністю до четвертого знаку. Який розмір базису треба при цьому взяти?
- 3. (20-40) Побудувати повний поліноміальний базис для рівнобедреного трикутника. Для рівностороннього трикутника знайти енергію перших трьох рівнів з точністю до четвертого знаку. Який розмір базису треба при цьому взяти?

§22. Взаємодія квантових систем з електромагнітним полем

- 1. (10) Вивести рівняння для еволюції середнього значення спіну в сталому магнітному полі.
- 2. (3) Яким способом найшвидше перевернути спін, приклавши магнітне поле?
- 3. (10) Дослідити рух електрона у сталому однорідному магнітному полі.
- 4. (20) Знайти час життя збуджених станів атома водню.

§24. Двоатомна молекула

- 1. (10) Для потенціалу Ленарда–Джонса знайти постійні коливально-обертального спектру. Чи можна таким потенціалом апроксимувати реальні потенціали молекул X₂?
- 2. (50) З'ясувати адекватність потенціалу

$$\frac{V}{m+k-\alpha}\left[\left(\alpha-k\right)\left(\frac{a}{r}\right)^m-m\left(\frac{r}{a}\right)^k\exp\left(-\alpha\left(\frac{r}{a}-1\right)\right)\right],$$

для апроксимації реальних потенціалів ковалентних молекул X_2 ?