Квантовая теория
Второй поток. Весна 2014
Список задач №4
Тема «Одномерное стационарное уравнение Шредингера»

А. Дискретный спектр

4.1. Общие свойства: локализация спектра, асимптотика волновой функции, подобие, движение уровней при изменении параметров

Одномерное стационарное уравнение Шредингера имеет вид

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

Для типичной потенциальной ямы будет использована форма записи потенциала

$$U(x)=-U_0 f\left(\frac{x}{a}\right),$$

где $f(0)=1$, $f(z)\geq 0$. Величина U_0 называется *глубиной ямы*, a − (характерной) *шириной ямы*. Безразмерный параметр

$$B=\frac{2mU_0a^2}{\hbar^2}$$

называется *борновским параметром*.

4.1.1. *обязательная* Может ли состояние с нулевой энергией связи ($E=0$) быть связанным в потенциале $U(x)$ таком, что $\lim\limits_{|x|\to\infty}U(x)=0$?

4.1.2. *обязательная* Оценить (параметрически и численно) энергию основного состояния нейтрона, находящегося над непроницаемой горизонтальной плоскостью в поле тяжести Земли. Оценить высоту области пространственной локализации нейтрона в этом состоянии.

4.1.3. Для какого потенциала $U(x)$ ВФ основного состояния описывается формулой

$$\psi(x)=\exp\left(-\frac{x^4}{4a^4}\right) ?$$

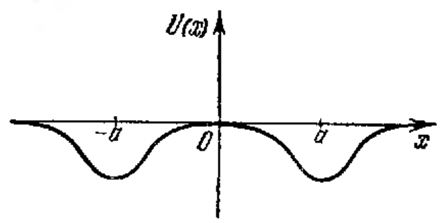
Нарисовать график $U(x)$. Чему равна энергия этого состояния, отсчитанная от минимума потенциала?

4.1.4. *обязательная* Оценить энергию основного состояния частицы в поле с потенциалом

$$U(x)=0 \qquad (x<0)$$

$$U(x)=-\frac{\alpha}{\sqrt{x}} \qquad (x>0)$$

4.1.5. Потенциал $U(x)$ представляет собой две одинаковые потенциальные ямы, причем $U(-x)=U(x)$ и $U(0)=0$. Показать, что средняя сила, с которой частица действует на ямы, для четных стационарных состояний дискретного спектра приводит эффективно к притяжению ям, а для нечетных состояний − к отталкиванию.



4.2. Слабый потенциал: модель дельта-ямы и ее комбинации

4.2.1. Вычислить средние значения квадрата координаты $\langle x^2 \rangle$ и квадрата импульса $\langle p^2 \rangle$ для частицы, находящейся в связанном состоянии в потенциале δ-ямы $U(x) = -q\delta(x)$.

4.2.2. Исследовать дискретный спектр частицы в поле потенциала, состоящего из дельта-ямы и дельта-барьера,

$$U(x) = -q\delta(x-a) + q\delta(x+a),$$

в зависимости от параметра $Q = \frac{2mqa}{\hbar^2}$.

4.2.3. *обязательная* Для гауссовой потенциальной ямы,

$$U(x) = -U_0 \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right),$$

вычислить относительную энергию связи $\varepsilon_0 = -\left(E_0/U_0\right)$ основного состояния при значении борновского параметра $B = 3$, используя модель дельта-ямы.

4.3. Сильный потенциал: гармонический осциллятор (как аппроксимация)

Гармонический осциллятор − система с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{q}^2}{2}.$$

Для его описания удобно использовать осцилляторную систему единиц, в которой $\hbar, m, \omega = 1$ и гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{\hat{q}^2}{2}$$

4.3.1. Доказать, что волновые функции стационарных состояний гармонического осциллятора $\psi_n(q)$ являются собственными функциями оператора Фурье.

4.3.2. Вычислить среднее значение оператора $\hat{p}^2\hat{q}^2$ в основном состоянии гармонического осциллятора.

4.3.3. Вычислить средние значения операторов $\hat{x}$, $\hat{x}^2$, $\hat{p}$ и $\hat{p}^2$ в n-м стационарном состоянии гармонического осциллятора $\varphi_n(x)$.

4.3.4. Вычислить отличные от нуля матричные элементы операторов $\hat{q}^3$ и $\hat{q}^4$ между волновыми функциями стационарных состояний гармонического осциллятора. Воспользоваться соотношением

$$\hat{q} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{a}^+ + \hat{a}\right).$$

4.3.5. Вычислить матричные элементы степеней координаты

$$\langle 0|x^{2014}|2015\rangle, \quad \langle 0|x^{2015}|2014\rangle, \quad \langle 0|x^{2015}|2015\rangle$$

между стационарными состояниями гармонического осциллятора $\varphi_n(x) \equiv |n\rangle$.

4.3.6. Для основного и первого возбужденного состояний гармонического осциллятора найти вероятность нахождения частицы в классически недоступной области.

4.3.7. Для какого потенциала $U(x)$ волновая функция основного состояния имеет вид

$$\psi(x) = \zeta \exp\left(-\frac{x^2}{2} - \eta|x|\right),$$

где ζ – нормировочный множитель?

4.3.8. Найти уровни энергии дискретного спектра частицы в поле с потенциалом

$$U(x) = \frac{x^2}{2} \quad (x > 0), \qquad U(x) = \infty \quad (x < 0).$$

4.3.9. Исследовать дискретный спектр частицы в поле с потенциалом

$$U(x) = \frac{kx^2}{2} + q\,\delta(x).$$

Нарисовать графики зависимостей $E_n(q)$ при постоянном k.

4.3.10. *обязательная* Для гауссовой потенциальной ямы

$$U(x) = -U_0 \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right)$$

вычислить относительные энергии связи $\varepsilon_i = -\left(E_i/U_0\right)$ основного ($i = 0$) и первого возбужденного ($i = 1$) состояний при значении борновского параметра $B = 3$, используя модель гармонического осциллятора.

4.4. Промежуточный случай: модели ступенчатых потенциалов

4.4.1. *обязательная* *Потенциальным ящиком* называется потенциал

$$U(x) = 0 \text{ при } |x| < a, \qquad U(x) = \infty \text{ при } |x| > a$$

а) Найти энергетический спектр частицы в потенциальном ящике.

б) Вычислить плотность вероятности значений координаты и импульса и их дисперсии для стационарных состояний частицы в потенциальном ящике.

в) Показать, что спектр такой системы при $n \to \infty$ близок к эквидистантному.

4.4.2. *обязательная* *Прямоугольной потенциальной ямой* (ППЯ) называется потенциал

$$U(x) = -U_0 \text{ при } |x| < a, \qquad U(x) = 0 \text{ при } |x| > a$$

Электрон находится в прямоугольной потенциальной яме с параметрами $a = 3 \cdot 10^{-8}$ *см* и $U_0 = 10$ *эВ*. Оценить (*не надо решать уравнение Шредингера!*) энергию основного состояния в такой системе.

4.4.2А. *обязательная* Электрон находится в прямоугольной потенциальной яме

$$U(x) = -U_0 \text{ при } |x| < a, \qquad U(x) = 0 \text{ при } |x| > a$$

с параметрами $a = 3 \cdot 10^{-8}$ см и $U_0 = 0.1$ эВ. Оценить (*не надо решать уравнение Шредингера!*) энергию основного состояния в такой системе.

4.4.3. Частица в потенциальном ящике (см. задачу 4.4.1) находится в состоянии с волновой функцией $\psi(x) = \zeta\left(a^2 - x^2\right)$, $|x| < a$, где ζ − нормировочный множитель.

а) Вычислить среднее значение энергии $\langle E \rangle$ в этом состоянии.

б) Вычислить фиделити $\mathfrak{F}$ ВФ (1) и точной ВФ φ_0 основного состояния.

4.4.4. Частица в потенциальном ящике находится в состоянии с волновой функцией

$$\psi(x) = \zeta\left(a^2 - x^2\right), \qquad |x| < a,$$

где ζ − нормировочный множитель. Вычислить дисперсию энергии в этом состоянии.

4.4.5. *обязательная* Для гауссовой потенциальной ямы

$$U(x) = -U_0 \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right)$$

вычислить относительные энергии связи $\varepsilon_i = -\left(E_i / U_0\right)$ основного ($i = 0$) и первого возбужденного ($i = 1$) состояний при значении борновского параметра $B = 3$, используя модель прямоугольной ямы.

4.4.6. Существует ли прямоугольная потенциальная яма, в которой у частицы есть только два связанных состояния с энергиями $E_0 = -1$ и $E_1 = -0.7$?

Если «НЕТ» − привести доказательство, если «ДА» − привести пример (параметры ямы).

4.4.7. *обязательная* Найти условие существования состояний дискретного спектра в *асимметричной* прямоугольной яме

$$U(x) = U_1 \ \text{при}\ x < -a, \quad U(x) = 0 \ \text{при}\ |x| < a, \quad U(x) = U_2 \ \text{при}\ x > a$$

Исследовать предельные случаи $U_1 \to \infty$ и $U_1 \to U_2$.

4.4.8. Для частицы в потенциальном ящике (см. задачу 4.4.1) определить вид операторов координаты и импульса в энергетическом представлении.

4.4.9. Для частицы, находящейся в трехмерном прямоугольном параллелепипедоидальном потенциальном ящике с непроницаемыми стенками с попарно несоизмеримыми квадратами сторон – вычислить функцию $P(S)$ распределения относительного расстояния между соседними уровнями

$$S_n = \frac{E_{n+1} - E_n}{\overline{\Delta E_n}}$$

где $\overline{\Delta E_n}$ − среднее расстояние между соседними уровнями в окрестности уровня E_n .

4.5. Численное отыскание дискретного спектра

4.5.1. *обязательная* Для прямоугольной потенциальной ямы (ППЯ)

$$U(x) = -U_0 \ \text{при}\ |x| < a, \qquad U(x) = 0 \ \text{при}\ |x| > a$$

вывести трансцендентное уравнение, описывающее дискретный спектр частицы, и вычислить с точностью 1% значения энергии основных состояний в ППЯ в условиях задач 4.4.2 и 4.4.2А, сравнив с ответами этих задач.

4.5.2. Для гауссовой потенциальной ямы

$$U(x) = -U_0 \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right),$$

вычислить (с тремя десятичными знаками) относительные энергии связи $\varepsilon_i = |E_i|/U_0$ основного ($i = 0$) и первого возбужденного ($i = 1$) состояний при значении борновского параметра $B = 3$.

4.5.3. Для *асимметричной* «эрмитовской» потенциальной ямы

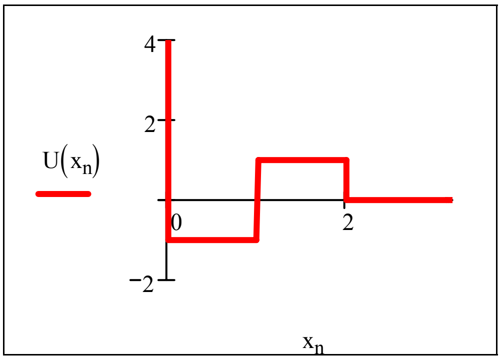
$$U(x) = -U_0\left(\frac{x}{a}\right)\exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right),$$

вычислить (с двумя десятичными знаками) относительную энергию связи основного состояния $\varepsilon_0 = |E_0|/U_0$ при значении борновского параметра $B = 2$.

B. Непрерывный спектр

4.6. Общие свойства: постановка задачи рассеяния, симметрия

4.6.1. *обязательная* Потенциал $U(x)$ имеет кусочно-постоянный характер:



$$U(x)=\infty \qquad x<0$$
$$U(x)=-1 \qquad 0<x<1$$
$$U(x)=1 \qquad 1<x<2$$
$$U(x)=0 \qquad 2<x$$

а) Указать интервал энергий, в котором энергетический спектр частицы в таком потенциале может быть дискретным.

б) Указать интервал энергий, в котором энергетический спектр частицы в такомпотенциале является невырожденным.задач 4.4.2 и 4.4.2А, сравнив с ответами этих задач.

4.6.2. Какую размерность имеют волновые функции стационарных состояний дискретного и непрерывного спектров для одномерного уравнения Шредингера?

4.6.3. Найти общие собственные функции гамильтониана свободного движения $\hat{H}_0$ и оператора инверсии $\hat{P}$.

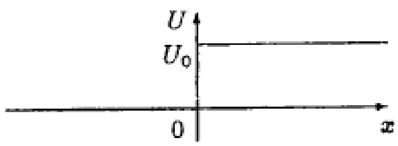
4.6.4. Потенциал $U(x)$ имеет вид ступеньки: $U(x)\to 0$ при $x\to-\infty$ и $U(x)\to U_0$. при $x\to\infty$. Найти зависимость коэффициента прохождения частицы от ее энергии E при $E\to U_0$.

4.7. «Точно решаемые» модели: дельта-потенциал, ступенчатые потенциалы и их комбинации

4.7.1. *обязательная* Частица падает слева в потенциальном поле прямоугольной «ступеньки»:

$$U(x)=0 \text{ при } x<0, \qquad U(x)=U_0 \text{ при } x>0.$$

Для заданной энергии E нарисовать график зависимости коэффициента прохождения T от параметра $\beta=U_0/E$



4.7.2. При отражении от прямоугольной ступеньки:

$$U(x)=0 \text{ при } x<0, \qquad U(x)=U_0 \text{ при } x>0$$

волновую функцию в области $x<0$ для $E<U_0$ можно представить виде

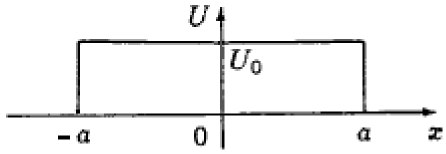
$$e^{ikx} + e^{-(ikx+\delta)}.$$

Найти зависимость $\delta(E)$.

4.7.3. *обязательная* Вычислить коэффициент прохождения $T(E)$ в поле прямоугольного потенциала

$$U(x) = U_0 \ \text{при} \ |x| < a, \qquad U(x) = 0 \ \text{при} \ |x| > a.$$

Рассмотреть случаи $U_0 > 0$ (прямоугольный барьер) и $U_0 < 0$ (прямоугольная яма).



Нарисовать графики зависимости $T(E)$ при малых ($B \ll 1$) и больших ($B \gg 1$) значениях борновского параметра B.

4.7.4. Вычислить коэффициент прохождения $T(E)$ в поле потенциала

$$U(x) = U_0 - q\,\delta(x) \ \text{при} \ |x| < a, \qquad U(x) = 0 \ \text{при} \ |x| > a.$$

Для случая, когда одновременно выполнены условия $\dfrac{2ma^2U_0}{\hbar^2} \gg 1$, $\dfrac{2maq}{\hbar^2} \gg 1$, найти (параметрически) значение энергии $E_{\text{res}} < U_0$, при котором имеет место резонансное туннелирование через барьер: $T(E_{\text{res}}) = 1$.

4.7.5. Вычислить коэффициент прохождения $T(E)$ в поле двойного δ-потенциала

$$U(x) = q\,\delta(x+a) + q\,\delta(x-a).$$

4.8. Численное исследование состояний непрерывного спектра

4.8.1. Найти численно (с двумя десятичными знаками) коэффициент прохождения T частицы с энергией $E = U_0/2$ через барьер гауссовой формы

$$U(x) = U_0 \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right)$$

при значении борновского параметра $B = 2$.

C. Периодические потенциалы

4.9. Периодические потенциалы

4.9.1. *обязательная* Доказать, что

$$\langle p|\hat{v}|p\rangle = \frac{\partial E}{\partial p} \ ,$$

где $\hat{v}$ − оператор скорости, $|p\rangle$ − стационарное состояние частицы с квазиимпульсом p и энергией E в произвольном периодическом потенциале.

4.9.2. Пусть $\varphi(x;p)$ − волновая функция стационарного состояния частицы с квазиимпульсом p и энергией $E(p)$ в поле периодического потенциала $V\left(x/d\right)$ [где $V\left(\xi+1\right)=V\left(\xi\right)$], причем при $p=0$ функция $E(p)$ имеет экстремум, т.е. имеет вид

$$E\left(p\to 0\right)=E_0+\frac{p^2}{2\tilde{m}}+\mathrm{O}\left(p^3\right),$$

где вещественный (но не обязательно положительный) параметр $\tilde{m}$ − *эффективная масса*. Далее, пусть $\Psi\left(x\right)$ является решением стационарного уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''+\left[V\left(\frac{x}{d}\right)+U\left(\frac{x}{a}\right)\right]\Psi=E\Psi,$$

где $U\left(x/a\right)$ − произвольный потенциал, плавно изменяющийся (не обязательно периодически) в пространстве по сравнению с $V\left(x/a\right)$: $a\ll d$. Показать, что функция $\Psi\left(x\right)$ представима в виде

$$\Psi\left(x\right)=\int F\left(k\right)\varphi\left(x;\hbar k\right)\frac{dk}{\sqrt{2\pi}},\quad F\left(p\right)=\int\Phi\left(x\right)e^{-ikx}\frac{dx}{\sqrt{2\pi}},$$

где функция $\Phi\left(x\right)$ есть решение уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2\tilde{m}}\Phi''+U\left(\frac{x}{a}\right)\Phi=\left(E-E_0\right)\Phi.$$

4.9.3. Частица движется в периодическом потенциале в присутствии однородного поля, т.е. в потенциале

$$U(x)=V(x)+Fx,\qquad V(x+d)=V(x),\ F=\text{const}.$$

В начальный момент времени волновая функция частицы имеет вид

$$\Psi(x,t=0)=\varphi(x;p_0),$$

где $\varphi(x;p_0)$ − волновая функция стационарного состояния частицы с квазиимпульсом p_0 и энергией E_0 в поле $V(x)$. Найти вид $\Psi(x,t)$ при $t>0$, считая, что $Fx\ll E_{\mathrm{g}}$, где E_{g} − масштаб энергии, характеризующий ширину запрещенных зон в спектре стационарных состояний в поле $V(x)$.

4.9.4. Найти волновые функции и собственные значения энергии для стационарных состояний в потенциале

$$U\left(x\right)=U_0>0\ \text{ при }\ x\le 0,\qquad U\left(x\right)=q\sum_{n=1}^{\infty}\delta\left(x-nd\right)\ \text{ при }\ x>0.$$

4.9.5. Найти коэффициент прохождения $T\left(E\right)$ для дираковской потенциальной гребенки

$$U(x)=q\sum_{n=0}^{N-1}\delta\left(x-nd\right),\ x>0,$$

считая $N\gg 1$ при $Nd=L$.

4.9.6. Электрон находится в поле плоской монохроматической стоячей электромагнитной волны с электрическим полем

$$E_y(x,t) = \mathcal{E} \cos kx \cos \omega t .$$

а) Используя метод Капицы (ЛЛI, §30, с. 123), найти эффективный потенциал $U(x)$ медленного движения электрона.

б) Для поля волны с параметрами $\mathcal{E} = 915$ Гс, $\omega = 1.77 \cdot 10^{15}$ с$^{-1}$, описывая состояния электрона одномерным стационарным уравнением Шредингера, выразить борновский параметр через основные параметры задачи и вычислить его значение; на его основе описать качественно структуру спектра.

в) Вычислить положение середины нижней разрешенной энергетической зоны.

г) Найти численно (с четырьмя знаками точности) границы нижней разрешенной зоны.

д) Оценить время туннелирования электрона между двумя соседними потенциальными ямами.

D. Остальное

4.10. Импульсное представление

4.10.1. Какую размерность имеют волновые функции стационарных состояний дискретного и непрерывного спектров для одномерного уравнения Шредингера в импульсном представлении?

4.10.2. Найти в импульсном представлении вид стационарного уравнения Шредингера для частицы, находящейся в поле $U(x)$.

4.10.3. Найти в импульсном представлении вид стационарного уравнения Шредингера для частицы, находящейся в поле периодического потенциала $V(x) = V(x+d)$.

4.10.4. *обязательная* Найти волновую функцию и значение энергии дискретного уровня для частицы в поле

$$U(x) = -q\,\delta(x),$$

решая задачу в импульсном представлении.

4.10.5. Найти вид волновых функций частицы в однородном поле

$$U(x) = F x$$

в импульсном представлении.

4.11. Функция Грина

4.11.1. Найти функцию Грина $G(x,x;E)$ для частицы в потенциальном ящике. Исследовать аналитические свойства $G(x,x;E)$ как функции переменной E.

4.11.2. Найти плотность состояний

а) для свободной частицы;

б) для частицы в потенциале $U(x) = q\delta(x)$ при $q > 0$ (δ-барьер) и $q < 0$ (δ-яма)

4.11.3. Найти плотность состояний для частицы в поле двойного δ-потенциала.