КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Задачи для практических занятий (7 семестр)

В.М.Галицкий, Б.М.Карнаков, В.И.Коган. Задачи по квантовой механике.–М.: Наука, 1981.

5.1. Для частицы со спином $s = 1/2$ найти из решения задачи на собственные функции и собственные значения спиновые функции $\Psi_{s_i}(i = 1, 2, 3)$, описывающие состояния частицы с определенной проекцией спина на координатные оси x, y, z.

5.2. Указать вид оператора проекции спина $\hat{s}_n$ на произвольное направление, определяемое единичным вектором $\mathbf{n}$.

Чему равно среднее значение проекции спина на ось $\mathbf{n}$ в состоянии с определенной проекцией спина $s_z = \pm 1/2$ на ось z?

Каковы вероятности проекции спина $\pm 1/2$ на направление $\mathbf{n}$ в указанных состояниях?

5.3. Найти собственные значения оператора $\hat{f} = a + \mathbf{b}\hat{\sigma}$ (a – число, $\mathbf{b}$ – обычный вектор, $\hat{\sigma}$ – матрицы Паули).

5.4. Могут ли квадраты проекций спина электрона на оси x, y, z иметь одновременно определенные значения?

5.6. Убедиться в полноте системы из четырех двухрядных матриц $\hat{1}, \hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$.

Показать, что коэффициенты в разложении произвольной квадратной матрицы 2-го ранга $\hat{A}$ по этим матрицам

$$\hat{A} = a_0\hat{1} + a_x\hat{\sigma}_x + a_y\hat{\sigma}_y + a_z\hat{\sigma}_z \equiv a_0 + \mathbf{a}\hat{\sigma}$$

могут быть вычислены по формулам

$$a_0 = \frac{1}{2}\ \mathrm{Sp}\hat{A}, \quad \mathbf{a} = \frac{1}{2}\ \mathrm{Sp}(\hat{\sigma}\hat{A}).$$

5.7. Каков явный вид операторов: $|\hat{\sigma}_z|$, $|\hat{\sigma}|$, $\hat{\sigma}\ [\hat{\sigma}\hat{\sigma}]$?

5.8. Упростить выражение $(\mathbf{a}\hat{\sigma})^n$ где $\mathbf{a}$ – обычный (числовой) вектор, $\hat{\sigma}$ – матрицы Паули, n – целое число.

5.9. Найти явное выражение оператора вида $\hat{F} = F(a + \mathbf{b}\hat{\sigma})$, где $F(x)$ – произвольная функция переменной x, $a = \mathrm{const}$, $\mathbf{b}$ – обычный вектор.

Рассмотреть, в частности, оператор $\hat{F} = \exp(i\mathbf{a}\hat{\sigma})$.

5.11. Для спина $s = 1/2$ указать вид повышающего и понижающего оператора $\hat{s}_\pm$ и рассмотреть их действие на собственные функции Ψ_{s_z}. Каковы операторы $\hat{s}_\pm^2$?

5.12. Показать, что для состояния, описываемого спиновой волновой функцией

$$\Psi = e^{i\gamma}\begin{pmatrix} \cos\alpha \\ e^{i\beta}\sin\alpha \end{pmatrix}$$

(это есть наиболее общий вид нормированной волновой функции спинового состояния частицы со спином $s = 1/2$; $0 \le \alpha \le \pi/2$, $0 \le \beta < 2\pi$), можно указать такую ось в пространстве, проекция спина на которую имеет определенное значение $+1/2$. Найти полярный и азимутальный углы этой оси.

5.13. Найти проекционные операторы $\hat{P}_{s_z=\pm 1/2}$ на состояния с определенным значением проекции спина $s_z = \pm 1/2$ на ось z.

5.14. Найти проекционные операторы $\hat{P}_{s_n=\pm 1/2}$ на состояния с определенным значением проекции спина $\pm 1/2$ на ось, направление которой оп- ределяется единичным вектором $\mathbf{n}$.

С помощью этих операторов найти спиновые функции $\Psi_{s_n=\pm 1/2}$.

5.15. Для частицы со спином $s = 1/2$ указать закон преобразования спиновой волновой функции

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

при вращении системы координат на угол φ_0 относительно оси, направление которой определяется единичным вектором $\mathbf{n}_0$.

Показать, что величина $\Phi^*\Psi \equiv \varphi_1^*\psi_1 + \varphi_2^*\psi_2$ не изменяется при указанном преобразовании, т.е. является скаляром.

5.17. Для двух частиц со спином $s = 1/2$ найти собственные функции Ψ_{SS_z} операторов суммарного спина (точнее, его квадрата) и его проекции на ось z.

Вид функции Ψ_{10} и Ψ_{00} найти одним из следующих способов, учитывая наиболее общий вид функции, отвечающей $S_z = 0$

$$\Psi_{S_z=0} = C_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 + C_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2$$

а) непосредственно из уравнения на собственные функции оператора $\hat{\mathbf{S}}^2$;
б) воспользовавшись операторами $\hat{S}_\pm$.

5.18. Показать, что оператор $\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2$ в состояниях системы из двух частиц, отвечающих определенному значению суммарного спина, также имеет определенное значение.

5.20. Представить выражение $(\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2)^2$ в виде, содержащем матрицы Паули $\hat{\sigma}_{1,2}$ в степени не выше первой. Индексы 1, 2 у матриц означают, что эти матрицы являются операторами, действующими в пространстве спиновых переменных 1-й и 2-й частиц.

5.21. Найти явный вид оператора $\hat{F} = F(a + b\ \hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2)$, где $F(x)$ – произвольная функция переменной x, a и b – некоторые числа.

5.22. Используя результат задачи 5.18, найти проекционные операторы $\hat{P}_{S=0,\ 1}$ на состояния двух частиц со спином $s = 1/2$, отвечающие определенному значению суммарного спина частиц.

5.24. Для системы из двух частиц со спином $s = 1/2$ найти проекционные операторы $\hat{P}_{SS_z}$ на состояния с определенным значением суммарного спина S и его проекции S_z на ось z.

5.25. Найти собственные функции и собственные значения следующих операторов:

$$a)\hat{V}_1 = a(\hat{\sigma}_{1z} + \hat{\sigma}_{2z}) + b\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2.$$

Параметры a, b - вещественны, так что операторы $\hat{V}_{1,2}$ – эрмитовы.

5.26. Спины N частиц, равные s каждый, складываются в результирующий спин $S = Ns$. Каков суммарный спин любых $2; 3; ...; n$ частиц в указанном состоянии?

5.27. Спиновая функция системы из N частиц со спином $s = 1/2$ имеет вид

$$\Psi = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2 \cdots \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_{n+1} \cdots \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_N .$$

Найти в указанном состоянии среднее значение квадрата суммарного спина системы частиц.

5.28. В условиях предыдущей задачи в частных случаях $n = 1$ и $n = N - 1$ найти вероятности различных значений величины S суммарного спина системы частиц.

5.29. Состояние частицы со спином $s = 1/2$ характеризуется определенными значениями квантовых чисел l, m, s_z. Найти в указанном состоянии вероятности различных значений полного момента $\mathbf{j} = \mathbf{1} + \mathbf{s}$ частицы.

5.30. Состояние некоторой системы характеризуется определенными значениями квантовых чисел J (момент системы) и $J_z = J$. Найти вероятности различных значений проекции момента J_n на ось, направление которой в пространтсве определяется единичным вектором $\mathbf{n}$.

5.32. Показать, что спиновая функция системы из N частиц со спином $s = 1/2$, отвечающая состоянию с максимально возможным значением $S = N/2$ суммарного спина, симметрична по отношению к перестановке спиновых переменных любых двух частиц.

Имеют ли определенную симметрию спиновые функции, отвечающие другим значениям суммарного спина? Сравнить со случаем $N = 2$.

11.19. Найти возможные термы возбужденных состояний атома с электронной конфигурацией (сверх заполенных оболочек; $n \neq n'$):
$a)\ nsn'p$; $\ )\ npn'p$; $\ )\ npn'd$.

11.20. Найти возможные термы атома со следующей электронной конфигурацией (сверх заполненных оболочек):

) $(np)^2$;   ) $(np)^3$;   ) $(np)^4$;   ) $(nd)^2$.

Пользуясь правилом Гунда, указать нормальный терм атома.

11.21. Определить основные термы атомов N, CL и ионов N^+, Cl^+.

11.22. Какова четность атомных термов, имеющих электронную конфигурацию (сверх заполненных оболочек):
) $(ns)^k$;   ) $(np)^k$;   ) $(nd)^k$;   ) $(np)^k(nd)^i$?

11.23. Указать атомные термы, возможные для электронной конфигурации $(nl)^2$.

11.24. Каковы мультиплетность $2S+1$ и полный орбитальный момент L основного состояния атома с электронной конфигурацией $(nl)^k$ сверх заполенных оболочек?

11.25. Каково число различных независимых состояний (не термов!) атома, отвечающих электронной конфигурации $(nl)^k$ сверх заполненных оболочек?

11.29. Используя выражение для электронной плотности нейтрального атома согласно модели Томаса – Ферми, найти зависимость от Z среднего расстояния электрона от ядра и среднего значения квадрата этой величины. Каково значение $< r^n >$ для $n \geq 3$?

11.30. Найти распределение электронов по импульсам в нейтральном атоме с зарядом ядра Z согласно модели Томаса – Ферми. Учесть, что универсальная функция $\chi(x)$ этой модели, определяющая объемную плотность электронов, монотонно убывает с ростом x.

Используя полученный результат, найти зависимость от заряда ядра Z средних величин импульса и кинетической энергии электрона.

11.31. В рамках модели Томаса – Ферми для нейтрального атома найти зависимость от заряда ядра Z: а) характерной величины орбитального момента электрона; б) энергии полной ионизации атома.

11.33. В модели Томаса – Ферми для нейтрального атома выразить через элекронную плотность $n(r)$ кинетическую энергию электронов, энергию их взаимодействия друг с другом и с ядром.

Используя полученные выражения, теорему вириала и поведение на малых расстояниях $r \to 0$ электростатического потенциала самосогласованного поля электронов и ядра

$$\varphi(r) \approx \frac{Z}{r} - 1,80 Z^{3/4},$$

получить численное значение энергии полной ионизации атома.

11.34. В приближении Томаса – Ферми получить выражение для полной энергии нейтрального атома через электронную плотность $n(r)$.

Рассматривая функционал $E[n(r)]$, показать, что нормированная функция ($\int n(r) dV = Z$), минимизирующая этот функционал, является решением уравнения Томаса – Ферми.

Используя полученный результат, найти энергию полной ионизации атома вариационным методом, выбрав универсальную функцию $\chi(x)$ модели в виде $\chi(x) = A\exp(-\alpha x)$, α – вариационный параметр. Сравнить полученное выражение для энергии ионизации и пробную функцию $\chi(x)$ при малых x с известными результатами точного численного решения.

11.35. Используя экстремальные свойства функционала $E\,[n\,(r)]$, установленные в предыдущей задаче, доказать в рамках модели Томаса – Ферми: а)теорему вириала; б) соотношение $U_e \ = -7U_{ee}$ между энергиями взаимодействия электронов друг с другом U_{ee} и с ядром U_e .

13.4. Найти в борновском приближении амплитуду рассеяния и полное сечение рассеяния частиц в полях $U(r)$, указанных ниже. Исследовать предельные случаи малых и больших энергий частиц. Указать условия применимости рассмотрения.

$$a)U(r) = \alpha\delta(r-R);)U(r) = U_0 e^{r/R};)U(r) = \frac{\alpha}{r}e^{r/R};)U(r) = \alpha/r^2;$$

$$)U(r) = \begin{cases} U_0, & r < R, \\ 0, & r > R; \end{cases}$$

$$)U(r) = U_0 e^{-r^2/R^2}$$

13.6. Показать, что в условиях применимости борновского приближения полное сечение рассеяния частиц $\sigma(E)$ в произвольном центральном поле $U(r)$ как функция энергии удовлетворяет неравенству

$$\frac{d}{dE}[E\sigma(E)] \geq 0,$$

т.е. $E\sigma(E)$ – монотонно растущая функция энергии E.

13.7. Показать, что при рассеянии частиц в поле притяжения (т.е. при $U(\mathbf{r}) \leq 0$) или в поле отталкивания ($U(\mathbf{r}) \geq 0$) в условиях применимости борновского приближения максимальное значение сечения рассеяния $\sigma(E)$ имеют частицы с энергией $E = 0$.

13.13. Выразить в борновском приближении амплитуду рассеяния на двух одинаковых силовых центрах, находящихся на расстоянии $\mathbf{a}$ друг от друга, т. е. $U(\mathbf{r}) = U_0(\mathbf{r}) + U_0(\mathbf{r}-\mathbf{a})$, через амплитуду рассеяния f_0^B на одном центре $U_0(\mathbf{r})$.

Найти соотношения между сечениями рассеяния на двух и на одном центрах в случаях:

а) $ka \ll 1$ (при этом величина kR может быть произвольной, R – радиус действия сил отдельного центра);

б) $kR \sim 1$ и $a \gg R$ (т.е. расстояние между центрами много больше радиуса действия сил отдельных центров).

13.17. Получить выражение для фазовых сдвигов $\delta_l(k)$ в условиях применимости борновского приближения непосредственно из разложения по парциальным волнам амплитуды рассеяния в центральном поле.

Указание. Воспользоваться известным из теории функций Бесселя соотношением $(x, y > 0)$:

$$\frac{\sin\sqrt{x^2+y^2-2xy\cos\varphi}}{\sqrt{x^2+y^2-2xy\cos\varphi}} =$$

$$= \frac{\pi}{2\sqrt{xy}}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)J_{l+1/2}(kx)J_{l+1/2}(ky)P_l(\cos\varphi).$$

13.19. В условиях применимости борновского приближения найти поведение фазовых сдвигов при энергии частицы $E \to 0$. Ограничиться потенциалами $U(r)$, убывающими при $r \to \infty$ быстрее дюбой степени r (например, $U\infty \;\; e^{-r/R}$).

13.20. Найти поведение борновских фазовых сдвигов δ_l^B (k с фиксированным значением l при $k \to \infty$. Ограничиться случаем потенциалов, поведение которых при $r \to 0$ удовлетворяет условию $rU(r) \to 0$.

13.22. Найти в борновском приближении фазовые сдвиги s-волн ($l = 0$) в полях: а) $U(r) = U_0 R\delta(r-R)$; б) $U(r) = U_0 e^{-r/R}$.

Используя полученный результат, найти для указанных полей сечение рассения медленных частиц.

13.23. Восстановить потенциал взаимодействия $U(r)$ по фазе рассеяния $\delta_0(k)$ $(l = 0)$, считая ее известной при всех энергиях частицы и предполагая, что $|\delta_0(k)| \ll 1$.

В качестве иллюстрации полученного результата рассмотреть зависимости $\delta_0(k)$ вида:

а) $\delta_0(k) = \text{const}$;

б) $\delta_0(k) = \frac{\alpha k}{1+\beta k^2}$.

В случае б) сравнить с результатом 13.22, б.

13.24. Найти точные значения фазовых сдвигов s-волн в полях:

$$a)\; U(r) = \begin{cases} \infty, & r < R, \\ 0, & r > R; \end{cases}$$

$$)\; U(r) = \begin{cases} -U_0, & r < R, \\ 0, & r > R. \end{cases}$$

Используя полученные результаты, найти для указанных полей сечения рассеяния медленных частиц. Указать условия применимости полученных выражений.