КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Решение задач по теме 11:

«Квазиклассическое приближение. Вариационный метод»

Задачи

1. Определите уровни энергии квантового линейного гармонического осциллятора в квазиклассическом приближении.

Вероятность частицы иметь координату z от z_1 до z_2

$$w = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dp_y \int_{z_1}^{z_2} dz \left|\Psi\left(x, p_y, z\right)\right|^2,$$

где $\Psi\left(x, p_y, z\right) = \int \frac{\exp\left(-\frac{ip_y y}{\hbar}\right)}{\sqrt{2\pi\hbar}} \Psi\left(x, y, z\right) dy$ – функция состояния частицы в представлении оператора $\hat{p}_y$.

Ответ: $w = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dp_y \int_{z_1}^{z_2} dz \left| \int \frac{\exp\left(-\frac{ip_y y}{\hbar}\right)}{\sqrt{2\pi\hbar}} \Psi\left(x, y, z\right) dy \right|^2$.

2. Для частицы, находящейся в потенциальном поле $U = U_0 |x|^{\nu}$, найдите в квазиклассическом приближении характер изменения расстояния между соседними энергетическими уровнями энергий с увеличением n в зависимости от ν.

В квазиклассическом приближении условие квантования:

$$\frac{1}{\hbar} \int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{2m\left(E_n - U\right)} dx = \pi\left(n + \frac{1}{2}\right),$$

$$\frac{1}{\hbar} \int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{2m\left(E_n - U_0 |x|^{\nu}\right)} dx = \pi\left(n + \frac{1}{2}\right),$$

где точка поворота $x_0 = \left|\frac{E_n}{U_0}\right|^{\frac{1}{\nu}}$. Найдем интеграл, сделав замену

$$|t|^{\nu} = \frac{U_0}{E_n} |x|^{\nu}, \quad t_0 = 1,$$

$$\frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar} \left|\frac{E_n}{U_0}\right|^{\frac{1}{\nu}} \int_{-1}^{1} \sqrt{1 - |t|^{\nu}} dt = E_n^{\frac{1}{\nu} + \frac{1}{2}} \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} U_0^{-\frac{1}{\nu}} C(\nu) = \pi\left(n + \frac{1}{2}\right),$$

$$E_n^{\frac{2+\nu}{2\nu}} = \frac{\hbar\pi}{C(\nu)\sqrt{2m}} U_0^{\frac{1}{\nu}} \left(n + \frac{1}{2}\right) = A(\nu)\left(n + \frac{1}{2}\right),$$

$$E_n = \widetilde{A}(\nu)\left(n + \frac{1}{2}\right)^{\frac{2\nu}{2+\nu}}.$$

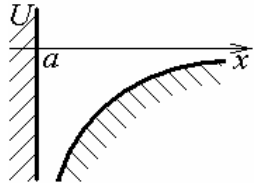
Расстояние между уровнями $\Delta n = 1$:

$$\Delta E_n = \frac{\partial E_n}{\partial n} \Delta n = \widetilde{A}(\nu) \frac{2\nu}{\nu + 2} \left(n + \frac{1}{2}\right)^{\frac{\nu - 2}{\nu + 2}}.$$

Если $\frac{\nu - 2}{\nu + 2} > 0$, то $n^{\frac{\nu - 2}{\nu + 2}} > 1$, тогда ΔE_n увеличивается, если $\frac{\nu - 2}{\nu + 2} < 0$, то $n^{\frac{\nu - 2}{\nu + 2}} < 1$, тогда ΔE_n уменьшается, при $\nu = 2$ потенциальное поле совпадает с гармоническим осциллятором, для которого уровни энергии эквидистантны.

Ответ: уровни энергии разрежаются при $\nu > 2$ и сгущаются при $\nu < 2$, при $\nu = 2$ расстояние между уровнями постоянно.

3. Используя квазиклассическое приближение, найдите верхние энергетические уровни энергии дискретного спектра частицы в поле



$$U(x)=\begin{cases}-\dfrac{\alpha}{x^2} & x>a;\\ \infty & x<a.\end{cases}$$

В квазиклассическом приближении условие квантования:

$$\frac{1}{\hbar}\int_{-x_0}^{x_0}\sqrt{2m(E_n-U)}dx=\pi\left(n+\frac{1}{2}\right),$$

$$\frac{1}{\hbar}\int_{a}^{x_0}\sqrt{2m\left(E_n+\frac{\alpha}{x^2}\right)}dx=\pi\left(n+\frac{1}{2}\right),$$

где точка поворота $x_0=\sqrt{\dfrac{\alpha}{E_n}}$. Верхние энергетические уровни дискретного спектра близки к нулю, при этом $n+\dfrac{1}{2}\approx n$. Найдем интеграл, положив в подынтегральном выражении $E_n=0$:

$$\frac{1}{\hbar}\int_{a}^{x_0}\sqrt{\frac{2m\alpha}{x^2}}dx=\frac{\sqrt{2m\alpha}}{\hbar}\int_{a}^{x_0}\frac{dx}{x}=\frac{\sqrt{2m\alpha}}{\hbar}\ln x\Big|_{a}^{x_0},$$

$$\frac{\sqrt{2m\alpha}}{\hbar}\ln\sqrt{\frac{\alpha}{a^2E_n}}=\pi n,\quad E_n=-\frac{\alpha}{a^2}e^{-\frac{\sqrt{2}\hbar\pi}{\sqrt{m\alpha}}n}.$$

Ответ: $E_n=-\dfrac{\alpha}{a^2}e^{-\frac{\sqrt{2}\hbar\pi}{\sqrt{m\alpha}}n}$.

4. Получите приближенное значение энергии основного состояния частицы массы m, **находящейся в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины** a, **вариационным методом, используя пробные функции вида:**

а) $\psi(x)=Ax(x-a)$, **б)** $\psi(x)=A\sin^2\dfrac{\pi x}{a}$,

в) $\psi(x)=A\left(\dfrac{a}{2}-\left|x-\dfrac{a}{2}\right|\right)$.

Энергия основного состояния равна минимуму от среднего значения оператора $\hat{H}$. Оператор Гамильтона

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}.$$

Найдем среднее значение энергии

$$\overline{E}=\left(\psi;\hat{H}\psi\right)=-\frac{\hbar^2}{2m}\int\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}dx=$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\Big|_{-\infty}^{\infty}+\frac{\hbar^2}{2m}\int\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial x}dx=\frac{\hbar^2}{2m}\int\left|\frac{\partial\psi}{\partial x}\right|^2dx.$$

Воспользуемся полученным выражением для предложенных функций:

а) Пронормируем функцию

$$|A|^2\int_0^a x^2(x-a)^2dx=|A|^2\left(\int_0^a x^4dx-2a\int_0^a x^3dx+a^2\int_0^a x^2dx\right)=$$

$$=|A|^2a^5\left(\frac{1}{5}-\frac{1}{2}+\frac{1}{3}\right)=\frac{|A|^2a^5}{30}=1,$$

откуда $$|A|=\sqrt{\frac{30}{a^5}}.$$

Производная функции:

$$\frac{\partial\psi}{\partial x}=A\frac{\partial}{\partial x}x(x-a)=A(2x-a)$$

Среднее значение энергии

$$\overline{E}=\frac{\hbar^2|A|^2}{2m}\int_0^a(2x-a)^2dx=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{30}{a^5}a^3\frac{1}{3}=\frac{5\hbar^2}{ma^2}.$$

б) Пронормируем функцию

$$|A|^2\int_0^a\sin^4\frac{\pi x}{a}dx=|A|^2\frac{1}{8}\int_0^a\left(2-4\cos\frac{2\pi x}{a}+1+\cos\frac{4\pi x}{a}\right)dx=$$

$$=|A|^2\frac{1}{8}\left(3x-4\frac{a}{2\pi x}\sin\frac{2\pi x}{a}+\frac{a}{4\pi x}\sin\frac{4\pi x}{a}\right)\Bigg|_0^a=\frac{3|A|^2a}{4}=1,$$

откуда $$|A|=\sqrt{\frac{4}{3a}}.$$

Производная функции:

$$\frac{\partial\psi}{\partial x}=A\frac{\partial}{\partial x}\sin^2\frac{\pi x}{a}=A\frac{\pi}{a}\sin\frac{\pi x}{a}\cos\frac{\pi x}{a}=\frac{A\pi}{2a}\sin\frac{2\pi x}{a}.$$

Среднее значение энергии

$$\overline{E}=\frac{\hbar^2|A|^2}{2m}\cdot\frac{\pi^2}{4a^2}\int_0^a\sin^2\frac{2\pi x}{a}dx=\frac{\hbar^2}{8m}\cdot\frac{4}{3a}\cdot\frac{\pi^2}{a^2}\cdot\frac{a}{2}=\frac{\pi^2\hbar^2}{12ma^2}.$$

в) Пронормируем функцию

$$|A|^2\int_0^a\left(\frac{a}{2}-\left|x-\frac{a}{2}\right|\right)^2dx=|A|^2\left(\int_0^{a/2}x^2dx+\int_{a/2}^a(a-x)^2dx\right)=$$

$$=|A|^2a^3\frac{1}{12}=\frac{|A|^2a^3}{12}=1,$$

откуда $$|A|=\sqrt{\frac{12}{a^3}}.$$

Производная функции:

$$\frac{\partial\psi}{\partial x}=A\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{a}{2}-\left|x-\frac{a}{2}\right|\right)=A\begin{cases}A & \text{при}\quad 0<x<a/2,\\ -A & \text{при}\quad a/2<x<a.\end{cases}$$

Среднее значение энергии

$$\overline{E}=\frac{\hbar^2|A|^2}{2m}\left(\int_0^{a/2}1^2dx+\int_{a/2}^a(-1)^2dx\right)=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{12}{a^3}a=\frac{6\hbar^2}{ma^2}.$$

Из вариантов а) $\overline{E}=\frac{5\hbar^2}{ma^2}$, б) $\overline{E}=\frac{\pi^2\hbar^2}{12ma^2}$, в) $\overline{E}=\frac{6\hbar^2}{ma^2}$ минимальное значение энергии в случае б) $\overline{E}=\frac{\pi^2\hbar^2}{12ma^2}$. Это значит, что наиболее близка к волновой функции основного состояния функция $\psi(x)=\sqrt{\frac{4}{3a}}\sin^2\frac{\pi x}{a}$.

Ответ: а) $\overline{E}=\frac{5\hbar^2}{ma^2}$, б) $\overline{E}=\frac{\pi^2\hbar^2}{12ma^2}$, в) $\overline{E}=\frac{6\hbar^2}{ma^2}$.

5. Найдите приближенное значение энергии квантового гармонического осциллятора вариационным методом, используя пробные функции вида:

а) $\psi(x)=\dfrac{A}{1+\dfrac{x^2}{a^2}}$, **б)** $\psi(x)=\dfrac{A}{\left(1+\dfrac{x^2}{a^2}\right)^2}$,

где $a=\sqrt{\dfrac{\hbar}{m\omega}}$.

Энергия основного состояния равна минимуму от среднего значения оператора $\hat{H}$. Оператор Гамильтона для гармонического осциллятора

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{m\omega^2x^2}{2}.$$

Найдем среднее значение энергии

$$\overline{E}=\left(\psi;\hat{H}\psi\right)=-\frac{\hbar^2}{2m}\int\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}dx+\frac{m\omega^2}{2}\int\psi^*x^2\psi dx=$$

$$=\frac{\hbar^2}{2m}\int\left|\frac{\partial\psi}{\partial x}\right|^2dx+\frac{m\omega^2}{2}\int|x\psi|^2dx.$$

Воспользуемся полученным выражением для предложенных функций:

а) Пронормируем функцию

$$|A|^2\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\left(1+\dfrac{x^2}{a^2}\right)^2}dx=\left|\begin{matrix}x=a\,\mathrm{tg}\,t\\ dx=\dfrac{adt}{\cos^2t}\end{matrix}\right|=|A|^2\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\frac{adt}{\cos^2t\left(1+\mathrm{tg}^2t\right)^2}=$$

$$=a|A|^2\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\cos^2tdt=\frac{a|A|^2}{2}\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}(1+\cos2t)dt=\frac{a\pi|A|^2}{2}=1,$$

откуда $$|A|=\sqrt{\frac{2}{a\pi}}.$$

Производная функции:

$$\frac{\partial\psi}{\partial x}=\frac{\partial}{\partial x}\frac{A}{1+\frac{x^2}{a^2}}=-\frac{2Ax}{a^2\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^2},$$

тогда

$$\left|\frac{\partial\psi}{\partial x}\right|^2=\frac{4|A|^2x^2}{a^4\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^4},\quad |x\psi|^2=\frac{|A|^2x^2}{\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^2}.$$

Среднее значение энергии

$$\overline{E}=\frac{2|A|^2\hbar^2}{ma^4}\int\frac{x^2dx}{\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^4}+\frac{|A|^2m\omega^2}{2}\int\frac{x^2dx}{\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^2},$$

где интегралы берутся от $-\infty$ до ∞:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{x^2dx}{\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^4}=\left|\begin{matrix}x=a\,\mathrm{tg}\,t\\ dx=\frac{adt}{\cos^2 t}\end{matrix}\right|=a^3\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\frac{\mathrm{tg}^2\,tdt}{\cos^2 t\left(1+\mathrm{tg}^2\,t\right)^4}=$$

$$=a^3\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\sin^2 t\cos^4 tdt=\frac{a^3}{8}\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}(1-\cos 2t)(1+\cos 2t)^2dt=$$

$$=\frac{a^3}{8}\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\left(1+\cos 2t-\cos^2 2t-\cos^3 2t\right)dt=\frac{a^3}{8}\left(\pi+0-\frac{\pi}{2}-0\right)=\frac{\pi a^3}{16},$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{x^2dx}{\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^2}=\left|\begin{matrix}x=a\,\mathrm{tg}\,t\\ dx=\frac{adt}{\cos^2 t}\end{matrix}\right|=a^3\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\frac{\mathrm{tg}^2\,tdt}{\cos^2 t\left(1+\mathrm{tg}^2\,t\right)^2}=$$

$$=a^3\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\sin^2 t\cos^2 tdt=\frac{a^3}{4}\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\sin^2 2tdt=\frac{a^3}{8}\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}(1-\cos 4t)dt=\frac{\pi a^3}{8}.$$

$$\overline{E}=\frac{2|A|^2\hbar^2}{ma^4}\frac{\pi a^3}{16}+\frac{|A|^2m\omega^2}{2}\frac{\pi a^3}{8}=\frac{|A|^2\pi a^3}{16}\left(2\frac{\hbar^2}{ma^4}+m\omega^2\right)$$

Учтем, что $a=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$, а $|A|=\sqrt{\frac{2}{a\pi}}$, тогда

$$\overline{E}=\frac{\hbar}{8m\omega}\left(2\frac{\hbar^2m^2\omega^2}{m\hbar^2}+m\omega^2\right)=\frac{3}{8}\hbar\omega.$$

б) Пронормируем функцию

$$|A|^2\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^4}dx=\left|\begin{matrix}x=a\,\mathrm{tg}\,t\\ dx=\frac{adt}{\cos^2 t}\end{matrix}\right|=a|A|^2\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\frac{dt}{\cos^2 t\left(1+\mathrm{tg}^2\,t\right)^4}=$$

$$=a|A|^2\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\cos^6 tdt=\frac{a|A|^2}{8}\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}(1+\cos 2t)^3dt=$$

$$=\frac{a|A|^2}{8}\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\left(1+3\cos 2t+3\cos^2 2t+\cos^3 2t\right)dt=\frac{5\pi a|A|^2}{16}=1,$$

откуда $$|A|=\sqrt{\frac{16}{5\pi a}}.$$

Производная функции:

$$\frac{\partial\psi}{\partial x}=\frac{\partial}{\partial x}\frac{A}{\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^2}=-\frac{4x}{a^2}\cdot\frac{A}{\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^3},$$

тогда

$$\left|\frac{\partial\psi}{\partial x}\right|^2=\frac{16|A|^2x^2}{a^4\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^6},\quad |x\psi|^2=\frac{16|A|^2x^2}{\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^4}.$$

Среднее значение энергии

$$\overline{E}=\frac{8|A|^2\hbar^2}{ma^4}\int\frac{x^2dx}{\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^6}+8|A|^2m\omega^2\int\frac{x^2dx}{\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^4},$$

где интегралы берутся от $-\infty$ до ∞:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{x^2dx}{\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^6}=\left|\begin{matrix}x=a\,\mathrm{tg}\,t\\ dx=\frac{adt}{\cos^2 t}\end{matrix}\right|=a^3\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\frac{\mathrm{tg}^2\,tdt}{\cos^2 t\left(1+\mathrm{tg}^2\,t\right)^6}=$$

$$=a^3\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\sin^2 t\cos^8 tdt=\frac{a^3}{32}\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}(1-\cos 2t)(1+\cos 2t)^4\,dt=\frac{5\pi a^3}{128}.$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{x^2dx}{\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^4}=\frac{\pi a^3}{16}.$$

$$\overline{E}=\frac{8|A|^2\hbar^2}{ma^4}\frac{5\pi a^3}{128}+8|A|^2m\omega^2\frac{\pi a^3}{16}=\frac{|A|^2\pi a^3}{16}\left(\frac{5\hbar^2}{ma^4}+8m\omega^2\right).$$

Учтем, что $a=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$, а $|A|=\sqrt{\frac{16}{5\pi a}}$, тогда

$$\overline{E}=\frac{a^2}{5}\left(\frac{5\hbar^2}{ma^4}+8m\omega^2\right)=\frac{\hbar}{5m\omega}\left(\frac{5\hbar^2m^2\omega^2}{m\hbar^2}+8m\omega^2\right)=\frac{13}{5}\hbar\omega.$$

Из вариантов а) $\overline{E}=\frac{3}{8}\hbar\omega$, б) $\overline{E}=\frac{13}{5}\hbar\omega$, минимальное значение энергии в случае а) $\overline{E}=\frac{3}{8}\hbar\omega$. Это значит, что наиболее близка к волновой функции основного состояния функция $\psi(x)=\frac{A}{1+\frac{x^2}{a^2}}$.

Ответ: а) $\overline{E}=\frac{3}{8}\hbar\omega$, б) $\overline{E}=\frac{13}{5}\hbar\omega$.