Egzamin pisemny

1. Cząstka o masie m porusza się w nieskończonej studni potencjału, w środku której znajduje się dodatkowy potencjał typu delta Diraca:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{dla} \quad x < -a \\ 0 & \text{dla} \quad -a < x < 0 \quad \text{obszar } I \\ V_0\delta(x) & \text{dla} \quad x = 0 \\ 0 & \text{dla} \quad 0 < x < a \quad \text{obszar } II \\ \infty & \text{dla} \quad a < x \end{cases},$$

   gdzie $a, V_0 > 0$. Znaleźć warunki kwantyzacji dla poziomów energetycznych.

   WSKAZÓWKA: Skorzystać z faktu, że potencjał jest symetryczny: $V(x) = V(-x)$.

   Rozwiązanie:

   Dla potencjałow z deltą mamy warunek skoku pochodnej

$$\psi'_{II}(0) - \psi'_I(0) = \frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(0).$$

   F. falowe spełaniające warunki brzegowe w $x = \pm a$:

$$\psi_I(x) = A\sin(k(a+x)), \qquad \psi_{II}(x) = \pm A\sin(k(a-x)),$$

   gdzie $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$. Znak + dla funkcji symetrycznej, znak − dla antysymetrycznej. Dla funkcji symetrycznej skok pochodnej daje:

$$-2Ak\cos(ka) = \frac{2mV_0}{\hbar^2}A\sin(ka) \;\rightarrow\; -ka\cot(ka) = \frac{mV_0 a}{\hbar^2}.$$

   Rozwiązanie graficzne.

   Dla funkcji antysymetrycznej: powinna znikać w zerze:

$$\sin(ka) = 0 \;\rightarrow\; ka = n\pi.$$

   Warunek skoku pochodnej jest spełniony automatycznie.

2. Zadanie nr 1 rozwiązać w pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń przyjmując jako zaburzenie część potencjału proporcjonalną do $\delta(x)$. Otrzymany wynik porównać z rozwiązaniem zadania 1.

   Rozwiązanie

   Funkcja falowa, która spełnia znika w $x = -a$

$$\psi(x) = A\sin(k(a+x)).$$

Warunek kwantyzacji

$$\psi(a) = 0 \ \rightarrow \sin 2ka = 0 \ \rightarrow k_n = \frac{n\pi}{2a}.$$

Energia

$$E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2}{2m} k_n^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} n^2.$$

Normalizacja

$$A^2 \int_{-a}^{a} \sin^2 \left(k_n(a+x)\right) \, dx = A^2 \frac{1}{k_n} \int_{0}^{2k_n a} \sin^2 y \, dy = \ldots$$

gdzie podstawiliśmy $y = k_n x$. Dalej

$$\ldots = A^2 \frac{1}{k_n} \int_{0}^{n\pi} \sin^2 y \, dy = A^2 \frac{2a}{n\pi} n \int_{0}^{\pi} \sin^2 y \, dy = A^2 a \ \rightarrow \ A^2 = \frac{1}{a^2}.$$

Pierwsza poprawka

$$E_n^{(1)} = V_0 \left|\psi(0)\right|^2 = \frac{V_0}{a} \sin^2 \frac{n\pi}{2} = \begin{cases} V_0/a & \text{dla} \quad n = 1, 3, 5, \ldots \\ \\ 0 & \text{dla} \quad n = 2, 4, 6, \ldots \end{cases}.$$

Czyli dla funkcji antysymetrycznych poprawka jest zero i rozwiązanie zerowe jest dokładne. Dla funkcji symetrycznych jest poprawka niezerowa, którą można wyliczyć z równaina kwantyzacji

$$-ka \cot(ka) = \frac{mV_0 a}{\hbar^2}$$

zauważając, że

$$ka = a\sqrt{\frac{2m(E_n^{(0)} + E_n^{(1)})}{\hbar^2}} = a\sqrt{\frac{2mE_n^{(0)}}{\hbar^2}} \sqrt{1 + \frac{E_n^{(1)}}{E_n^{(0)}}} = ak_n \left(1 + \frac{E_n^{(1)}}{2E_n^{(0)}}\right) = \frac{n\pi}{2} + \delta,$$

gdzie

$$\delta = \frac{2ma^2}{n\pi\hbar^2} E_n^{(1)}$$

uważamy za mały parametr (podobnie jak V_0). Ponieważ

$$-ka \cot(ka) = -\left(\frac{n\pi}{2} + \delta\right) \cot\left(\frac{n\pi}{2} + \delta\right) = \frac{n\pi}{2} \delta = \frac{a^2 m}{\hbar^2} E_n^{(1)}$$

mamy ostatecznie

$$\frac{a^2 m}{\hbar^2} E_n^{(1)} = \frac{mV_0 a}{\hbar^2} \ \rightarrow \ E_n^{(1)} = \frac{V_0}{a}$$

jak poprzednio.

3. Równanie radialne dla trójwymiarowego oscylatora harmonicznego przyjmuje postać

$$\left[-\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)-\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-V(r)\right)+\frac{l(l+1)}{r^2}\right]u(r)=0$$

gdzie

$$V(r)=\frac{1}{2}m\omega^2r^2.$$

Znaleźć poziomy energetyczne tego oscylatora. Podać degenerację pierwszych trzech poziomów i porównać ze wzorem na energię sumy trzech niezależnych oscylatorów o tej samej częstości ω.

WSKAZÓWKA: Wprowadzić nową zmienną

$$\rho=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}r.$$

Pokazać, że dla dużych r mamy $u=f(\rho)e^{-\rho^2/2}$, a potem rozwiązać równanie na $f(\rho)$ metodą szeregów.

Rozwiązanie

W nowych zmiennych

$$\left[-\frac{d^2}{d\rho^2}-\frac{2}{\rho}\frac{d}{d\rho}+\rho^2+\frac{l(l+1)}{\rho^2}-\varepsilon\right]u(\rho)=0,\ \varepsilon=\frac{2E}{\hbar\omega}.$$

Asymptotyka:

$$u(\rho)=f(\rho)e^{-\rho^2/2}.$$

Stąd:

$$u'=\left(f'-\rho f\right)e^{-\rho^2/2},\ u''=\left(f''-2\rho f'-f+\rho^2f\right)e^{-\rho^2/2}.$$

Równanie

$$-f''+2\left(\rho-\frac{1}{\rho}\right)f'+\left(\frac{l(l+1)}{\rho^2}-\varepsilon+3\right)f=0,$$

lub

$$f''+\frac{2}{\rho}f'-\frac{l(l+1)}{\rho^2}f=2\rho f'+(3-\varepsilon)f.$$

Szereg

$$\begin{aligned}
f &= \sum_{n=0}a_n\rho^{n+\alpha}=\sum_{n=-2}a_{n+2}\rho^{n+\alpha+2},\\
f' &= \sum_{n=0}a_n(n+\alpha)\rho^{n+\alpha-1}=\sum_{n=-2}a_{n+2}(n+2+\alpha)\rho^{n+\alpha+1},\\
f'' &= \sum_{n=0}a_n(n+\alpha)(n+\alpha+1)\rho^{n+\alpha-2}=\sum_{n=-2}a_{n+2}(n+\alpha+2)(n+\alpha+1)\rho^{n+\alpha}.
\end{aligned}$$

Podstawiając

$$\begin{aligned} & \sum_{n=-2} a_{n+2}\left[(n+\alpha+2)(n+\alpha+1)+2(n+\alpha+2)-l(l+1)\right]\rho^{n+\alpha} \\ = & \sum_{n=0} a_n\left[2(n+\alpha)+3-\varepsilon\right]\rho^{n+\alpha}. \end{aligned}$$

Warunki "początkowe":

$$\begin{aligned} n &= -2 \rightarrow \alpha(\alpha+1)-l(l+1)=0, \\ n &= -1 \rightarrow (1+\alpha)(\alpha+2)-l(l+1)=0, \end{aligned}$$

dają rozwiąznia

$$\begin{aligned} \text{parzyste} &: \quad \alpha = l, \\ \text{nieparzyste} &: \quad \alpha = l-1. \end{aligned}$$

Warunek urwania:

$$\varepsilon = 3 + 2(n+\alpha)$$

daje energie

$$\begin{aligned} E_{n,l} &= \hbar\omega\left(n+l+\frac{3}{2}\right) \text{ dla } n = 2N, \\ E_{n,l} &= \hbar\omega\left(n+l-1+\frac{3}{2}\right) \text{ dla } n = 2N+1. \end{aligned}$$

W sumie

$$E_{N,l} = \hbar\omega\left(2N+l+\frac{3}{2}\right).$$

Stan podstawowy: $N = 0,\ l = 0$, brak degeneracji.

Pierwszy stan wzbudzony: $N = 0$, $l = 1$, trzyktortna degeneracja ze względu na $m = -1, 0, 1$. W przypadku kartezjańskim: $|1,0,0\rangle, |0,1,0\rangle, |0,0,1\rangle$.

Drugi stan wzbudzony: $N = 1$, $l = 0$ (brak degeneracji), lub $N = 0$, $l = 2$, (pięciokrotna degeneracja $2l{+}1$), w sumie sześciokrotna. To się zgadza z oscylatorem "kartezjańskim": $|1,1,0\rangle, |1,0,1\rangle, |0,1,1\rangle, |2,0,0\rangle, |0,2,0\rangle, |0,0,2\rangle$.

4. Cząstka o masie m porusza się w potencjale harmonicznym:

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2.$$

Oszacować tę energię korzystając z zasady wariacyjnej, przyjmując jako funkcję próbną

$$\begin{aligned} \psi_\alpha(x) &= A_\alpha\left(\alpha^2 - x^2\right) \quad \text{dla} \quad -\alpha \le x \le \alpha, \\ \psi_\alpha(x) &= 0 \quad \text{dla} \quad x < -\alpha \quad \text{oraz} \quad \alpha < x \end{aligned}$$

gdzie $\alpha > 0$. Jak dokładne jest to oszacowanie?

Rozwiązanie

Rozwiązanie dokładne daje

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

Unormowanie funkcji próbnej

$$A_\alpha^2 \int_{-\alpha}^{\alpha} dx\,(\alpha^2 - x^2)^2 = A_\alpha^2 \int_{-\alpha}^{\alpha} dx(\alpha^4 - 2\alpha^2 x^2 + x^4) = \frac{16}{15}\alpha^5 A_\alpha^2 \rightarrow A_\alpha^2 = \frac{15}{16}\frac{1}{\alpha^5}$$

Druga pochodna funkcji próbnej:

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi = A_\alpha \frac{d^2}{dx^2}(\alpha^2 - x^2) = -2A_\alpha.$$

Średnia z energii kinetycznej:

$$E_{kin} = \int_{-\alpha}^{\alpha} dx\,\psi\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi\right) = A_\alpha^2 \frac{\hbar^2}{m}\int_{-\alpha}^{\alpha} dx\,(\alpha^2 - x^2) = A_\alpha^2 \frac{\hbar^2}{m}\frac{4}{3}\alpha^3 = \frac{5}{4}\frac{1}{\alpha^2}\frac{\hbar^2}{m}.$$

Średnia z energii potencjalnej:

$$E_{pot} = \frac{1}{2}m\omega^2 A_\alpha^2 \int_{-\alpha}^{\alpha} dx(\alpha^4 x^2 - 2\alpha^2 x^4 + x^6) = \frac{1}{14}m\omega^2\alpha^2.$$

Wyrażenie do zminimalizowania

$$E(\alpha) = \frac{5}{4}\frac{1}{\alpha^2}\frac{\hbar^2}{m} + \frac{1}{14}m\omega^2\alpha^2.$$

Można minimalizować ze względu na α^2:

$$\begin{aligned}\frac{dE(\alpha^2)}{d\alpha^2} &= -\frac{1}{\alpha^4}\frac{5}{4}\frac{\hbar^2}{m} + \frac{1}{14}m\omega^2 = 0 \\ \alpha^4 &= \frac{35}{2}\frac{\hbar^2}{m^2\omega^2} \quad \rightarrow \quad \alpha^2 = \sqrt{\frac{35}{2}}\frac{\hbar}{m\omega}.\end{aligned}$$

Energia

$$E_0 = \left(\frac{5}{4}\sqrt{\frac{2}{35}} + \frac{1}{14}\sqrt{\frac{35}{2}}\right)\hbar\omega = \sqrt{\frac{5}{14}}\hbar\omega.$$

Zamiast 1/2 mamy $\sqrt{5/14} = 0.6$, czyli dokładność 20%.