Квантова механика упражнения

Андон Рангелов, кабинет В 40, email: rangelov@phys.uni-sofia.bg , интернет страница за задачите от семинарите http://course.quantum-bg.org

1 Пресмятане на енергии по метода на вариациите

Ако искаме да намерим енергията на основното свързано състояние за Хамилтониан $\hat{H}$, но не можем да решим стационарното уравнение на Шрьодингер, то удобно и лесно е да използваме вариационният метод. С вариационният метод намираме горна граница на енергията на основното свързано състояние.

Теорема:

Ако изберем произволна пробна и нормирана вълнова функция Ψ то $\Rightarrow$

$$\left\langle \hat{H} \right\rangle \geq E_0,$$

където E_0 е енергията на основното състояние а $\left\langle \hat{H} \right\rangle = \left\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \right\rangle$ е средното на Хамилтониана.

Доказателство:

Понеже Хамилтониана е ермитов оператор то собствените му функции ψ_n $\quad(\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n)$ ще образуват базис и тогава можем да разложим пробната вълнова функция Ψ по този базис $\Rightarrow$

$$\Psi = \sum_n c_n \psi_n$$

а от това, че Ψ е нормирана $\Rightarrow$

$$1 = \langle \Psi | \Psi \rangle = \left\langle \sum_m c_m \psi_m | \sum_n c_n \psi_n \right\rangle = \sum_n \sum_m c_m^* c_n \underbrace{\langle \psi_m | \psi_n \rangle}_{=\delta_{n,m}} = \sum_n |c_n|^2 = 1,$$

от друга страна имаме:

$$\left\langle \hat{H} \right\rangle = \left\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \right\rangle = \left\langle \sum_m c_m \psi_m | \sum_n c_n \hat{H} \psi_n \right\rangle = \sum_n \sum_m c_m^* c_n E_n \underbrace{\langle \psi_m | \psi_n \rangle}_{=\delta_{n,m}} = \sum_n E_n |c_n|^2,$$

но енергията на основното състояние E_0 по дефиниция е най-малката енергия $(E_0 \leq E_n)\Rightarrow$

$$\left\langle \hat{H} \right\rangle \geq E_0 \underbrace{\sum_n |c_n|^2}_{=1}$$

с това теоремата е доказана.

Забележка:

Забележете, че пробната вълнова функция Ψ може да е произволна. Различните пробни вълнови функции ще дават различни горни граници. Избора на пробна вълнова функция е въпрос на творчество и на физична интуиция.

1.1

Използвайки вариационният метод пресметнете енергията на основното състояние на едномерен хармоничен осцилатор.

Забележка:

Използвайте следната пробна вълнова функция $\Psi\left(x\right)=Ae^{-bx^2}$. Използвайте още и интеграла на Поасон $\int_{-\infty}^{\infty}e^{-x^2}dx=\sqrt{\pi}$.

1.2

Използвайки вариационният метод пресметнете енергията на основното състояние на потенциал с делта функция, тоест на Хамилтониан от вида:

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}-\alpha\delta\left(x\right)$$

Забележка:

Използвайте следната пробна вълнова функция $\Psi\left(x\right)=Ae^{-bx^2}$.

1.3

Намерете горна граница за енергията на основно състояние на безкрайно дълбока едномерна правоъгълна яма, като използвате следната пробна вълнова функция:

$$\Psi\left(x\right)=\begin{cases} Ax & 0\leq x\leq a/2 \\ A\left(a-x\right) & a/2\leq x\leq a \\ 0 & \text{всички останали} \end{cases}$$

1.4

Използвайки вариационният метод пресметнете енергията на основното състояние за частица с маса m намираща се в потенциал от вида $V\left(x\right)=V_0x^4$ (ахармоничен осцилатор).

Забележка:

Използвайте следната пробна вълнова функция $\Psi\left(x\right)=Ae^{-bx^2}$.

1.5

Използвайки вариационният метод пресметнете енергията на основното състояние за Хелиев атом.

Решения:

1.1

Първо нека да нормираме пробната вълнова функция $\Psi(x) = Ae^{-bx^2}$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2} dx = \frac{A^2}{\sqrt{2b}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2} d\left(\sqrt{2b}x\right) = \frac{A^2\sqrt{\pi}}{\sqrt{2b}} = 1$$

$\Rightarrow$

$$A = \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/4}$$

Сега смятаме средното на Хамилтониана $\left\langle \hat{H} \right\rangle = \left\langle \hat{T} \right\rangle + \left\langle \hat{V} \right\rangle \Rightarrow$

$$\begin{aligned}\left\langle \hat{T} \right\rangle &= \left\langle \Psi|\hat{T}|\Psi \right\rangle = -\frac{\hbar^2 A^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-bx^2} \left(\frac{d^2 e^{-bx^2}}{dx^2}\right) dx = -\frac{\hbar^2 A^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-bx^2} d\left(-2bxe^{-bx^2}\right) = \\ &= \frac{\hbar^2 A^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} 4bx^2 e^{-2bx^2} dx = -\frac{\hbar^2 A^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} bxd\left(e^{-2bx^2}\right) = \frac{\hbar^2 A^2 b}{2m\sqrt{2b}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2} d\left(x\sqrt{2b}\right)}_{=\sqrt{\pi}} = \frac{\hbar^2 b}{2m}\end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned}\left\langle \hat{V} \right\rangle &= \left\langle \Psi|\frac{1}{2}m\omega^2 x^2|\Psi \right\rangle = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2} x^2 dx = -\frac{1}{8b}m\omega^2 A^2 \int_{-\infty}^{\infty} xd\left(e^{-2bx^2}\right) = \\ &= \frac{1}{8b}m\omega^2 A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2} dx = \frac{1}{8b\sqrt{2b}}m\omega^2 A^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2} d\left(x\sqrt{2b}\right)}_{=\sqrt{\pi}} = \frac{m\omega^2}{8b}\end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$\left\langle \hat{H} \right\rangle = \frac{\hbar^2 b}{2m} + \frac{m\omega^2}{8b}$$

Според теоремата $\left\langle \hat{H} \right\rangle \geq E_0$ за всяко b така че нека да намерим възможно най-малката горна граница за така избраната пробна вълнова функция:

$$\frac{d}{db}\left\langle \hat{H} \right\rangle = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{m\omega^2}{8b^2} = 0 \Rightarrow b = \frac{m\omega}{2\hbar} \Rightarrow \left\langle \hat{H} \right\rangle_{\min} = \frac{1}{2}\omega\hbar$$

което е както знаем точният резултата за минималната енергия на хармоничният осцилатор.

1.2

Ползваме резултата от предишната задача за нормировката и за $\left\langle \hat{T} \right\rangle$ остава само да сметнем $\left\langle \hat{V} \right\rangle \Rightarrow$

$$\left\langle \hat{V} \right\rangle = -\alpha A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2} \delta(x)\, dx = -\alpha\sqrt{\frac{2b}{\pi}}$$

или окончателно за $\left\langle \hat{H} \right\rangle \Rightarrow$

$$\left\langle \hat{H} \right\rangle = \frac{\hbar^2 b}{2m} - \alpha\sqrt{\frac{2b}{\pi}}$$

Имаме $\left\langle \hat{H} \right\rangle \geq E_0$ за всяко b, така че нека да намерим възможно най-малката горна граница за така избраната пробна вълнова функция$\Rightarrow$

$$\frac{d}{db}\left\langle \hat{H} \right\rangle = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi b}} = 0 \Rightarrow b = \frac{2m^2\alpha^2}{\pi\hbar^4} \Rightarrow \left\langle \hat{H} \right\rangle_{\min} = -\frac{m\alpha^2}{\pi\hbar^2}$$

1.3

Нека първо да намерим нормировъчният множител A

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx = |A|^2 \left(\int_0^{a/2} x^2 dx + \int_{a/2}^{a} (a-x)^2 dx \right) = |A|^2 \frac{a^3}{12} = 1 \Rightarrow A = \frac{2}{a}\sqrt{\frac{3}{a}}$$

сега нека да намерим $\frac{d}{dx}\Psi(x) \Rightarrow$

$$\frac{d}{dx}\Psi(x) = \begin{cases} A & 0 \leq x \leq a/2 \\ -A & a/2 \leq x \leq a \\ 0 & \text{всички останали} \end{cases}$$

Производната на стъпаловидната функция е делта функция $\left(\frac{d}{dx}\theta(x) = \delta(x)\right) \Rightarrow$

$$\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) = A\delta(x) - 2A\delta(x - a/2) + A\delta(x-a)$$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned} \left\langle \hat{H} \right\rangle &= -\frac{\hbar^2 A}{2m}\int_0^a [\delta(x) - 2\delta(x-a/2) + \delta(x-a)]\Psi(x)\,dx = -\frac{\hbar^2 A}{2m}[\Psi(0) - 2\Psi(a/2) + \Psi(a)] = \\ &= \frac{\hbar^2 A}{2m}a = \frac{6\hbar^2 A}{ma^2} \end{aligned}$$

1.4

От първата задача знаем, че:

$$\begin{aligned} A &= \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/4}, \\ \left\langle \hat{T} \right\rangle &= \frac{\hbar^2 b}{2m}. \end{aligned}$$

остава да пресметнем $\left\langle \hat{V} \right\rangle$

$$\left\langle \hat{V} \right\rangle = \left\langle \Psi | V_0 x^4 | \Psi \right\rangle = A^2 V_0 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2} x^4 dx = \frac{3V_0}{16b^2}$$

$\Rightarrow$

$$\left\langle \hat{H} \right\rangle = \frac{\hbar^2 b}{2m} + \frac{3V_0}{16b^2}$$

$\Rightarrow$

$$\frac{d}{db}\left\langle \hat{H} \right\rangle = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{3V_0}{8b^3} = 0 \Rightarrow b = \left(\frac{3mV_0}{4\hbar^2}\right)^{1/3}$$

$\Rightarrow$

$$\left\langle \hat{H} \right\rangle_{\min} = \frac{\hbar^2 \left(\frac{3mV_0}{4\hbar^2}\right)^{1/3}}{2m} + \frac{3V_0}{16\left(\frac{3mV_0}{4\hbar^2}\right)^{2/3}}$$