Rozwiązania zadań z drugiego kolokwium z mechaniki kwantowej I
8 stycznia 2005 r.

Zadanie 1

Zgodnie z zasadą wariacyjną dla układu o hamiltonianie $\hat{H}$ energia stanu podstawowego układu $E \leq (\psi, \hat{H}\psi)$ dla dowolnej unormowanej funkcji próbnej ψ. W tym zadaniu mamy $\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2\mu} - V_0 e^{-\frac{r}{a}}$ i $\psi = \sqrt{\frac{\lambda^3}{8\pi a^3}} e^{-\frac{\lambda r}{2a}}$.
Stąd $(\psi, \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2\mu}\psi) = \frac{1}{2\mu}(\hat{\vec{p}}\psi, \hat{\vec{p}}\psi) = \frac{1}{2\mu}\int d^3r |\frac{\hbar}{i}\frac{d\psi}{dr}|^2 = \frac{\hbar^2\lambda^3}{16\mu\pi a^3} 4\pi \int_0^\infty drr^2 \frac{\lambda^2}{4a^2} e^{-\frac{\lambda r}{a}} =$
$= \frac{\hbar^2\lambda^2}{16\mu a^2}\int_0^\infty dx x^2 e^{-x} = \frac{\hbar^2\lambda^2}{8\mu a^2}$
oraz $(\psi, V\psi) = -V_0 \frac{\lambda^3}{8\pi a^3} 4\pi \int_0^\infty drr^2 e^{-\frac{(\lambda+1)r}{a}} = -V_0 \frac{\lambda^3}{2(\lambda+1)^3}\int_0^\infty dx x^2 e^{-x} = -V_0 \frac{\lambda^3}{(\lambda+1)^3}$,
czyli $(\psi, \hat{H}\psi) = (\frac{\lambda^2}{8b} - \frac{\lambda^3}{(\lambda+1)^3})V_0$, gdzie $b = \frac{\mu V_0 a^2}{\hbar^2}$.
Najlepsza górna granica odpowiada minimum tej funkcji, czyli poszukajmy wartości λ, dla której jej pochodna wynosi zero: $\frac{\lambda}{4b} - \frac{3\lambda^2(1+\lambda)-3\lambda^3}{(\lambda+1)^4} = \frac{\lambda}{4b} - \frac{3\lambda^2}{(\lambda+1)^4} = 0$, co dla dodatnich λ oznacza po prostu $\frac{(\lambda+1)^4}{\lambda} = 12b$. Przy podanej wartości $b = \frac{4}{3}$ mamy równanie $\frac{(\lambda+1)^4}{\lambda} = 16$, którego interesującym nas rozwiązaniem (zgodnie z podpowiedzią w treści zadania) jest $\lambda = 1$ - drugie dodatnie rozwiązanie $\lambda = 0,087...$ odpowiada maksimum badanej funkcji.
Ostatecznie $E \leq (\frac{3}{32} - \frac{1}{8})V_0 = -\frac{1}{32}V_0$.
Uwaga:
W tym zadaniu prawdziwe są równości: $\int d^3r|\frac{d\psi}{dr}|^2 = \int d^3r|\frac{1}{r}\frac{d(r\psi)}{dr}|^2 = -\int d^3r\psi^* \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{d\psi}{dr})$.

Zadanie 2

W zerowym rzędzie mamy energie $E_n^0 = \frac{\hbar^2 n^2\pi^2}{2ma^2}$ $(n = 1, 2, 3, ..)$ i odpowiadające im ortonormalne funkcje falowe

$$\psi_n^0(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a} & 0 < x < a, \\ 0 & \text{pozostałe } x. \end{cases}$$

Ponieważ $\cos\frac{\pi x}{a}\sin\frac{n\pi x}{a} = \frac{1}{2}(\sin\frac{(n+1)\pi x}{a} + \sin\frac{(n-1)\pi x}{a})$, to

$$V'\psi_n^0 = \begin{cases} \frac{1}{2}V_0(\psi_{n+1}^0 + \psi_{n-1}^0) & n > 1, \\ \frac{1}{2}V_0\psi_2^0 & n = 1 \end{cases}$$

i

$$(\psi_k^0, V'\psi_n^0) = \begin{cases} \frac{1}{2}V_0(\delta_{k,n+1} + \delta_{k,n-1}) & n > 1, \\ \frac{1}{2}V_0\delta_{k,2} & n = 1. \end{cases}$$

W pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń $E_n^1 = (\psi_n^0, V'\psi_n^0) = \frac{1}{2}V_0 \cdot 0 = 0$.
W drugim rzędzie rachunku zaburzeń dla $n > 1$:
$E_n^2 = \sum_{k\neq n}\frac{|(\psi_k^0, V'\psi_n^0)|^2}{E_n^0 - E_k^0} = \frac{V_0^2}{4}\frac{2ma^2}{\hbar^2\pi^2}(\frac{1}{n^2-(n+1)^2} + \frac{1}{n^2-(n-1)^2}) = \frac{ma^2V_0^2}{2\hbar^2\pi^2}(\frac{-1}{2n+1} + \frac{1}{2n-1}) = \frac{ma^2V_0^2}{(4n^2-1)\hbar^2\pi^2}$,
a dla stanu podstawowego $n = 1$:
$E_1^2 = \sum_{k\neq 1}\frac{|(\psi_k^0, V'\psi_1^0)|^2}{E_1^0 - E_k^0} = \frac{V_0^2}{4}\frac{2ma^2}{\hbar^2\pi^2}\frac{1}{1^2-(1+1)^2} = \frac{ma^2V_0^2}{2\hbar^2\pi^2}\frac{1}{-3} = -\frac{ma^2V_0^2}{6\hbar^2\pi^2}$.

Zadanie 3

Stany związane występują w tym potencjale dla $-V_0 < E < 0$ i w przybliżeniu kwaziklasycznym odpowiadające im energie określa warunek kwantowania Bohra-Sommerfelda: $\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))}dx = (n + \frac{1}{2})\pi$, gdzie x_1 i x_2 - klasyczne punkty zwrotne, w których zeruje się wyrażenie podpierwiastkowe, a $n = 0, 1, 2, ...$. Dla podanego potencjału z równania $E + V_0(1 - \frac{|x|}{a}) = 0$ otrzymujemy $x_2 = -x_1 = a(1 + \frac{E}{V_0})$ i z parzystości funkcji podcałkowej

$\int_{-x_2}^{x_2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0 - V_0\frac{|x|}{a})}dx = 2\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \int_0^{x_2} \sqrt{E + V_0 - \frac{V_0}{a}x)}dx =$

$= 2\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}(-\frac{2a}{3V_0}(\sqrt{E + V_0 - \frac{V_0}{a}x})^3)|_0^{x_2} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\frac{4a}{3V_0}(\sqrt{E + V_0})^3 = (n + \frac{1}{2})\pi.$

Stąd $E + V_0 = [(n + \frac{1}{2})\pi\frac{3V_0}{4a}\sqrt{\frac{\hbar^2}{2m}}]^{\frac{2}{3}} = [(n + \frac{1}{2})^2\frac{9\pi^2V_0^2\hbar^2}{32ma^2}]^{\frac{1}{3}}$,

czyli $E = -V_0(1 - [(n + \frac{1}{2})^2\frac{9\pi^2\hbar^2}{32mV_0a^2}]^{\frac{1}{3}})$.

Ponieważ dla stanów związanych musi być $E < 0$, czyli $(n + \frac{1}{2})^2\frac{9\pi^2\hbar^2}{32mV_0a^2} < 1$, to otrzymujemy warunek $(n + \frac{1}{2}) < \sqrt{\frac{32mV_0a^2}{9\pi^2\hbar^2}}$. Dla $\frac{mV_0a^2}{\hbar^2} = 2\pi^2$ oznacza to $(n + \frac{1}{2}) < \sqrt{\frac{64}{9}} = \frac{8}{3} = 2\frac{2}{3}$, czyli istnieją tylko trzy stany związane odpowiadające $n = 0, 1, 2$.