Листок 5. Одномерные квантовые системы в координатном представлении

Все задачи в этом листке, кроме отмеченных звездочкой, являются обязательными.
Крайний срок сдачи письменных решений — **8 декабря**.

Напомним некоторые определения.

- Линейный оператор A в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$ называется *эрмитовым (симметрическим)*, если область его определения $\mathcal{D}_A$ образует всюду плотное множество в $\mathcal{H}$ (т.е., $\overline{\mathcal{D}}_A = \mathcal{H}$) и для любых векторов $\psi_1, \psi_2 \in \mathcal{D}_A$ выполнено равенство:

$$(A\psi_1, \psi_2) = (\psi_1, A\psi_2).$$

- Оператор $A^\dagger$ называется *сопряженным* линейному оператору A со всюду плотной областью определения $\mathcal{D}_A \subset \mathcal{H}$, если для любой пары векторов $\psi \in \mathcal{D}_A$, $\phi \in \mathcal{D}_{A^\dagger} \subset \mathcal{H}$ выполнено равенство:

$$(A\psi, \phi) = (\psi, A^\dagger \phi).$$

  Для эрмитова оператора A с очевидностью выполнено включение $\mathcal{D}_A \subset \mathcal{D}_{A^\dagger}$ и, кроме того, $A\psi = A^\dagger\psi \ \ \forall\, \psi \in \mathcal{D}_A$. Другими словами, сопряженный оператор $A^\dagger$ является *расширением* эрмитова оператора A: $A \subset A^\dagger$.

- Линейный оператор A со всюду плотной областью определения $\mathcal{D}_A$ называется самосопряженным, если $A = A^\dagger$, то есть $\mathcal{D}_A = \mathcal{D}_{A^\dagger}$ и $A\psi = A^\dagger\psi \ \ \forall\, \psi \in \mathcal{D}_A$ (любой самосопряженный оператор является эрмитовым).

1. Рассмотрим оператор $P = i\,\dfrac{d}{dx}$ на следующих пространствах комплекснозначных функций вещенственного аргумента с интегрируемым квадратом модуля:

   i. $L_2(-\infty, +\infty)$ со скалярным произведением $(\psi_1, \psi_2) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x)\psi_2(x)dx$;
   ii. $L_2[0, +\infty)$ со скалярным произведением $(\psi_1, \psi_2) = \int_0^{+\infty} \psi_1^*(x)\psi_2(x)dx$;
   iii. $L_2[0, 1]$ со скалярным произведением $(\psi_1, \psi_2) = \int_0^1 \psi_1^*(x)\psi_2(x)dx$;

   В качестве области определения $\mathcal{D}_P$ в каждом случае выберем множество дифференцируемых (почти всюду) функций ψ таких, что $\frac{d\psi}{dx} \in L_2[a, b]$, где a и b — границы соответствующих интервалов в определениях i-iii.

   Для каждого из пространств $L_2[a, b]$ заданием некоторых граничных условий в a и b на функции из $\mathcal{D}_P$ определите:

   (a) Подмножество функций $\tilde{\mathcal{D}}_P$, на котором оператор P эрмитов. Найдите его собственные значения и соответствующие собственные функции из $\tilde{\mathcal{D}}_P$. Постройте сопряженный оператор $P^\dagger$ (укажите его область определения $\mathcal{D}_{P^\dagger}$).

   (b) Найдите самосопряженное расширение оператора P (если оно существует) для каждого из пространств $L_2[a, b]$. Найдите собственные значения и собственные функции самосопряженного расширения P и убедитесь, что набор собственных функций образует полный ортонормированный набор (базис) соответствующего пространства.

   (c) Докажите, что в пространстве $L_2[0, 1]$ существует более, чем одно самосопряженное расширение оператора P.

   (d) На примере пространств $L_2[a, b]$ введенных в i-iii проиллюстрируйте следующую теорему об *индексах дефекта* эрмитова оператора:

Теорема. Пусть в некотором гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$ задан эрмитов оператор F. Обозначим N_+ и N_- количество независимых решений задачи на собственные значения оператора F в пространстве $\mathcal{H}$

$$F\psi = +i\lambda\,\psi \qquad \text{и} \qquad F\psi = -i\lambda\,\psi,$$

соответственно, где $\lambda \in \mathbb{R}$ — *вещественный* параметр, $\psi \in \mathcal{H}$. Тогда:

- Если $N_+ = N_- = 0$, то оператор F самосопряжен в $\mathcal{H}$;
- Если $N_+ = N_- = N$, то оператор F допускает самосопряженное расширение, реализуемое наложением N дополнительных условий на функции из пространства $\mathcal{H}$;
- Если $N_+ \neq N_-$, то оператор F не имеет самосопряженного расширения (является *максимально эрмитовым*).

2. Рассмотрим стационарное уравнение Шредингера для одномерной частицы массы m в поле потенциала $U(x)$:

$$(H\psi)(x) \;=\; \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{d^2}{dx^2} + U(x)\right)\psi(x) \;=\; E\,\psi(x),$$

где $U(x)$ — вещественная ограниченная функция, имеющая лишь конечное число разрывов первого рода на интервале $(-\infty, +\infty)$. Докажите, что:

(a) Собственные значения энергии E, отвечающие состояниям дискретного спектра (т.е., $\psi(x) : \psi'(x) \in L_2[\mathbb{R}]$) имеют кратность 1. Соответствуюшие собственные функции могут быть выбраны действительными.

(*Указание.* Предположите существование двух функций $\psi_i(x)$, $i = 1, 2$, отвечающих одному собственному значению E, и исследуйте поведение вронскиана $W(x) = \psi_1(x)\psi_2'(x) - \psi_2(x)\psi_1'(x)$.)

(b) Если потенциал $U(x)$ – четная функция, то все собственные функции дискретного спектра имеют определенную четность.

(c) Состояния дискретного спектра ортогональны любым другим собственным функциям гамильтониана H (не обязательно отвечающим состояниям дискретного спектра).

(d) * Рассмотрим собственные функции $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$, отвечающие состояниям дискретного спектра с энергиями $E_1 < E_2$. Докажите, что между двумя последовательными нулями функции $\psi_1(x)$ обязательно найдется хотя бы один нуль функции $\psi_2(x)$.

3. (a) Найдите энергетические уровни и нормированные волновые функции стационарных состояний (иными словами, собственные значения и собственные вектора гамильтониана в координатном представлении) для одномерной частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины a:

$$U(x) \;=\; \begin{cases} 0 & \text{при } 0 \le x \le a, \\ +\infty & \text{при } x < 0 \text{ и } x > a. \end{cases}$$

(b) Определите в этих состояниях средние значения и дисперсии координаты и импульса чистицы.

(c) Для состояния, задаваемого в начальный момент времени волновой функцией $\psi(x) = A\,x(x-a)$ при $0 \le x \le a$ (A – нормировочная константа), $\psi(x) = 0$ при $x > a$ и $x < 0$, найдите распределение вероятностей различных значений энергии частицы и ее среднее значение.

4. (a) Постройте наборы четных и нечетных волновых функций стационарных состояний дискретного спектра для одномерной частицы в прямоугольной потенциальной яме ширины a:

$$U(x) = \begin{cases} -U_0 < 0 & \text{при } |x| \leq a/2, \\ 0 & \text{при } |x| > a/2. \end{cases}$$

   (b) Найдите условия квантования значений энергии частицы. Убедитесь, что основное состоние частицы (состояние с наименьшим значением энергии) имеет четную волновую функцию, и что четные и нечетные волновые функции чередуются с возрастанием энергии. Докажите, что частица имеет ровно N связанных состояний (состояний дискретного спектра) в случае, если выполнены неравенства

$$N - 1 < \frac{a\sqrt{2mU_0}}{\pi\hbar} \leq N\,.$$

5. * **Туннельный эффект.** Постройте решение стационарного уравнения Шредингера для одномерной массивной частицы, взаимодействующей с прямоугольным потенциальным барьером

$$U(x) = \begin{cases} U_0 > 0 & \text{при } 0 \leq x \leq a, \\ 0 & \text{при } x < 0 \text{ и } x > a, \end{cases}$$

которое задает в области $x > a$ волну, распространяющуюся направо:

$$\psi(x) = S\, e^{i\sqrt{\varepsilon}x}, \qquad \text{где } \varepsilon = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad S = const,$$

а в области $x < 0$ композицию двух волн, распространяющихся в противоположных направлениях - налетающей слева на барьер и отраженной:

$$\psi(x) = e^{i\sqrt{\varepsilon}x} + R\, e^{-i\sqrt{\varepsilon}x}, \qquad R = const\,.$$

Как объясняется такая интерпертация?

Вычислите коэффициент прохождения волны через барьер $|S|^2$.

(a) в случае $E < U_0$,

(b) в случае $E > U_0$.