


**МИНОБРНАУКИ РОССИИ**

**Федеральное государственное бюджетное  
образовательное учреждение высшего образования  
«Тульский государственный университет»**

**Естественнонаучный институт  
Кафедра «Физики»**

Утверждено на заседании кафедры  
«Физики»  
«31» августа 2020 г., протокол № 1

Заведующий кафедрой

 Р.Н.Ростовцев

**МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ  
по проведению самостоятельной работы студента  
по дисциплине (модулю)  
«ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА»**

по направлению подготовки  
**01.04.03 Механика и математическое моделирование**  
с направленностью (профилем)  
**Механика деформируемого твердого тела**

Форма обучения: очная

Идентификационный номер образовательной программы: 010403-01-21

Тула 2021 год

**Разработчик методических указаний**

Колмаков Ю.Н., профессор, к.ф.-м.н., доцент  
(ФИО, должность, ученая степень, ученое звание)



(подпись)

Назначение и сроки выполнения мероприятий по реализации всех форм самостоятельной работы.

Самостоятельная работа планируется и выполняется в соответствии с Государственными образовательными стандартами направления подготовки для специальности *01.04.03 Механика и математическое моделирование* (профиль подготовки: *Механика деформируемого твердого тела* (магистерская программа)), и в соответствии с учебным планом и рабочей программой дисциплины «Теоретическая физика» для студентов очной формы обучения специальности *01.04.03 Механика и математическое моделирование* (профиль подготовки: *Механика деформируемого твердого тела*) ТулГУ.

Самостоятельная работа студентов осуществляется в течение 2-го семестра срока обучения.

I. Цели и задачи выполнения самостоятельной работы по дисциплине «Теоретическая физика»:

1) закрепить знания и навыки, полученные студентами при изучении раздела курса дисциплины «Теоретическая физика» на лекционных и практических занятиях;

2) получить систему практических навыков использования этих знаний для постановки математической задачи описания любого явления или процесса, связанного с изучаемыми законами теоретической физики, и последовательного решения этой задачи;

3) сформировать у студентов единую, логически непротиворечивую физическую картину, связывающую все изучаемые явления, теории и модели их описания. При этом решается задача формирования научного мировоззрения и современного физического мышления;

4) научиться самостоятельно работать с учебной и научной литературой, справочниками и энциклопедиями.

II. Содержание самостоятельной работы по дисциплине «Теоретическая физика».

Самостоятельная работа является неотъемлемой частью рабочей программы учебного плана студента в рамках изучения курса «Теоретическая физика».

На выполнение самостоятельной работы отводится заданное учебным планом и рабочей программой количество часов самостоятельных занятий студента. Мероприятия по самостоятельной работе выполняются в течение всего семестра изучения дисциплины «Теоретическая физика».

В качестве элементов самостоятельной внеаудиторной работы по дисциплине «Теоретическая физика» студенты специальности *01.04.03 Механика и математическое моделирование* (профиль подготовки: *магистерская программа*) выполняют следующие виды работ:

1) изучение разделов дисциплины, вынесенных для самостоятельной работы в соответствии с разделом 4.6 рабочей программы, а также тех тем (по указанию преподавателя), которые были не рассмотрены по причине пропуска аудиторных занятий из-за праздничных дней и привлечения студентов к дежурствам;

2) подготовка к двум текущим аттестационным процедурам контроля текущей успеваемости и к итоговому зачетному занятию по дисциплине «Теоретическая физика» в конце семестра, в ходе которых студенты обязаны выполнить контрольные практические задания в виде тестов, проверочных вопросов и простых модельных задач, образцы которых приведены в разделе 6 рабочей программы;

3) самостоятельное выполнение индивидуальных практических заданий по указанию преподавателя из числа тех заданий по курсу «Теоретическая физика», условия которых приведены в Приложении 1.

Самостоятельная работа выполняется с привлечением всех информационных возможностей (библиотека ТулГУ – учебная, монографическая, периодическая литература, электронные средства информации – Inet, другое.

### III. Методика выполнения самостоятельной работы

1) Отчеты по выполненным заданиям представляются студентом на одном из последних занятий семестра, предназначенном для контрольных мероприятий в виде конспекта или тетради с решениями заданий.

2) Решения сопровождаются текстовыми пояснениями, как это делается при написании научной статьи или отчета.

3) В текстовом пояснении необходимо обосновать выбор метода решения, выбор используемых теоретических посылок, объяснять путь решения;

4) окончательный ответ получается в виде формулы в общем виде. Должны быть проделаны все этапы получения этой формулы без пропусков. Для получения числового ответа в полученную формулу должна быть сделана подстановка всех используемых данных в системе СИ. Числовой ответ должен быть получен в единицах системы СИ с точностью не менее трех значащих цифр;

5) все используемые данные из справочной литературы (коэффициенты, постоянные, математические преобразования) должны быть приведены с указанием на источник цитирования.

**УСЛОВИЯ ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАДАНИЙ**  
для выполнения самостоятельной работы по дисциплине  
«Теоретическая физика»

**Свободная частица.**

1.1. В момент времени  $t = 0$  свободная частица описывается волновой функцией  $\Psi(x, 0) = A \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0x\right)$ . Определить коэффициент  $A$  и область, где локализована частица. найти плотность тока  $\vec{j}$ , созданного ее движением.

1.2. Для свободной частицы, состояние которой описывается волновой функцией  $\psi(x) = A \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0x\right)$ , найти средние координату, импульс, вычислить  $\langle \Delta x^2 \rangle, \langle \Delta p^2 \rangle$  и проверить соотношение неопределенностей.

1.3. Считая, что волновая функция, приведенная в предыдущей задаче, определяет волновой пакет в начальный момент времени  $t = 0$ , найти  $\Psi(t)$ , плотность вероятности  $\rho(x, t)$  и плотность тока  $\vec{j}(x, t)$  (рассмотреть распыление волнового пакета со временем).

**Квантовомеханические операторы и их свойства:**

2.1. Вычислить коммутаторы проекций операторов радиус-вектора и импульса:  $[\hat{r}_i, \hat{r}_j], [\hat{r}_i, \hat{p}_j]$  и  $[\hat{p}_i, \hat{p}_j]$ .

2.2. Найти коммутатор операторов  $\left(x \frac{d}{dx}\right)^2$  и  $\left(\frac{d}{dx} x\right)^2$ .

2.3. Найти коммутатор оператора  $\hat{x}$  и оператора Лапласа.

2.4. Найти операторы трансляции, переводящие:

а)  $\psi(x)$  в  $\psi(x + a)$ ; б)  $\psi(\vec{r})$  в  $\psi(\vec{r} + \vec{a})$ ;  $\psi(\varphi)$  в  $\psi(\varphi + \alpha)$ , где  $\varphi$  - угловая переменная (это оператор поворота пространства на угол  $\alpha$ ).

2.5. Найти собственные функции и собственные значения оператора  $x + \frac{d}{dx}$ .

2.6. Найти собственные функции и собственные значения оператора  $\sin \frac{d}{d\varphi}$ .

2.7. Определить квадрат оператора  $i\hbar \vec{\nabla} + \vec{A}(\vec{r})$ .

2.8. Для операторов  $\hat{L}$  и  $\hat{M}$ , удовлетворяющих коммутационному условию  $\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L} = 1$ , найти: а)  $\hat{L}^2\hat{M} - \hat{M}\hat{L}^2$ ; б)  $f(\hat{L})\hat{M} - \hat{M}f(\hat{L})$ .

2.9. Доказать справедливость соотношения

$$e^{\hat{L}} \hat{a} e^{-\hat{L}} = \hat{a} + [\hat{L}, \hat{a}] + \frac{1}{2!} [\hat{L}, [\hat{L}, \hat{a}]] + \frac{1}{3!} [\hat{L}, [\hat{L}, [\hat{L}, \hat{a}]]] + \dots$$

2.10. Найти оператор, эрмитово-сопряженный оператору  $\frac{d}{dx}$ .

2.11. Найти оператор, эрмитово-сопряженный произведению операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$ .

2.12. Доказать самосопряженность оператора Лапласа.

2.13. Из выражения оператора момента импульса в декартовой системе координат

$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$ , получить выражения для операторов  $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$  и  $\hat{L}^2$  в сферической системе координат.

2.14. Доказать следующие коммутационные соотношения для проекций операторов координаты, импульса и момента импульса:

а)  $[\hat{L}_i, \hat{x}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{x}_k$ ;  $[\hat{L}_i, \hat{p}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{p}_k$ , где  $\epsilon_{ijk}$  - антисимметричный единичный тензор 3-го ранга, для которого  $\epsilon_{ijk} = -\epsilon_{ikj}$ ,  $\epsilon_{123} = 1$  (1,2,3 - соответствуют индексам x, y, z);

б)  $[\hat{x}_i, \hat{L}^2] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{L}_j\hat{x}_k - i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{x}_j\hat{L}_k$ ;  $[\hat{p}_i, \hat{L}^2] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{L}_j\hat{p}_k - i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{p}_j\hat{L}_k$ ;

в)  $[\hat{L}_i, (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2)] = 0$ ,  $[\hat{L}_i, (x^2 + y^2 + z^2)] = 0$ ;  $[\hat{p}^2, \hat{L}^2] = [\hat{r}^2, \hat{L}^2] = 0$ ;

г)  $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{L}_k$ ,  $[\hat{L}_i, \hat{L}^2] = 0$ ;

д) показать, что в состоянии  $\psi$  с определенным значением  $\hat{L}_z$ , (для которого  $\hat{L}_z\psi = \hbar m\psi$ ) средние значения  $\hat{L}_x$  и  $\hat{L}_y$  равны нулю.

### Соотношения неопределенностей:

3.1. Показать, что если два оператора  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  удовлетворяют перестановочному соотношению  $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = i\hat{C}$ , причем  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  - эрмитовы, то имеет место соотношение:

$$\sqrt{(\Delta\hat{A})^2} \cdot \sqrt{(\Delta\hat{B})^2} \geq \frac{|\langle\hat{C}\rangle|}{2}.$$

Используя это соотношение, найти соотношение неопределенности для операторов  $\hat{q}$  и  $F(\hat{p})$ , если  $\hat{q}$  и  $\hat{p}$  удовлетворяют перестановочному соотношению  $\hat{q}\hat{p} - \hat{p}\hat{q} = i\hbar$ . (Указание: функцию  $F(\hat{p})$  представить в виде ряда Тейлора

3.2. Оценить энергию основного состояния осциллятора, используя соотношение неопределенностей.

3.3. Оценить энергию электрона на  $K$  оболочке атома с порядковым номером  $Z$  в нерелятивистском и релятивистском случае.

3.4. Оценить энергию основного состояния двухэлектронного атома, заряд ядра которого равен  $Z$ , с помощью соотношения неопределенностей.

3.5. Найти волновую функцию такого состояния для одномерного движения частицы, чтобы произведение неопределенностей квантовомеханических операторов  $\hat{x}$  и  $\hat{p}_x$ , т.е.

$$\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p_x)^2\rangle$$

было минимальным.

## Уравнение Шредингера и зависимость величин от времени:

4.1. Волновая функция в произвольный момент времени определяется через волновую функцию в начальный момент времени с помощью некоторого оператора  $\hat{S}(t)$ , зависящего от времени:  $\Psi(t) = \hat{S}(t)\Psi(0)$ . Показать, что оператор  $\hat{S}(t)$  подчиняется дифференциальному уравнению  $i\hbar \frac{d\hat{S}}{dt} = \hat{H}\hat{S}(t)$ , где  $\hat{H}$  - оператор Гамильтона, а в том случае, когда  $\hat{H}$  не

зависит от времени, то оператор  $\hat{S}(t)$  имеет вид  $\hat{S}(t) = e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$ .

4.2. Составить операторы  $\frac{d\hat{r}}{dt}$  и  $\frac{d\hat{p}}{dt}$ .

4.3. Показать, что основное уравнение классической динамики  $\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F}$ , где  $\vec{p}$  - импульс,  $\vec{F}$  - сила, действующая на частицу, для пространственных средних (математических ожиданий) имеет место и в квантовой механике. Показать, что для системы частиц при отсутствии внешних сил импульс системы будет интегралом движения.

4.4. Показать, что среднее значение импульса в стационарном состоянии дискретного спектра  $\langle \hat{p} \rangle = 0$ .

4.5. Для классической скобки Пуассона  $(f, g)$  выполнено соотношение  $(f, gu) = g(f, u) + (f, g)u$ , где  $f, g, h$  - функции, представляющие физические величины. Считая, что данное соотношение выполняется и для операторов,  $\hat{f}, \hat{g}, \hat{h}$  определить выражение для квантовой скобки Пуассона.

## Квазиклассическое приближение, теория Бора-Зоммерфельда:

5.1. Пользуясь постулатом Бора-Зоммерфельда, проквантовать движение одномерного квантового гармонического осциллятора с потенциальной энергией  $U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$ .

5.2. Используя постулат Бора-Зоммерфельда, найти уровни энергии электрона, движущегося по эллиптической орбите вблизи ядра с зарядом  $Ze$ .

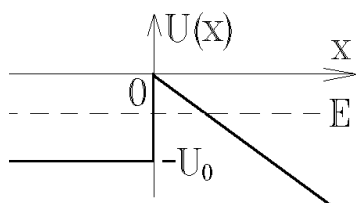
5.3. Частица массы  $m$  вертикально падает на горизонтальную пластину и упруго от нее отражается. Используя постулат Бора-Зоммерфельда, проквантовать движение частицы, определить разрешенные высоты  $h_n$  и вычислить уровни энергии.

5.4. Определить в квазиклассическом приближении спектр энергии частицы в одномерном потенциальном поле  $U(x) = -\frac{U_0}{ch^2(x/a)}$ .

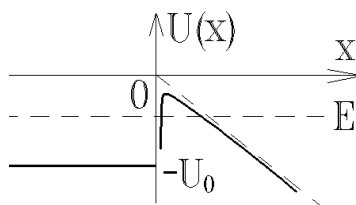
5.5. Определить в квазиклассическом приближении среднее значение кинетической энергии стационарного состояния и найти в этом приближении среднюю кинетическую

энергию одномерного осциллятора в поле  $U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$ .

5.6. Вычислить в квазиклассическом приближении коэффициенты прохождения  $D$  и отражения  $R$  частицы с массой  $m$  и с энергией  $E$ , падающей на одномерный прямоугольный потенциальный барьер ширины  $a$  и высоты  $U_0 > E$ .



5.7. Вычислить в квазиклассическом приближении коэффициент прохождения электронов с энергией  $E$  через поверхность металла под действием сильного электрического поля с напряженностью  $\vec{E}$ , направленной перпендикулярно к поверхности металла (вдоль оси  $x$ , см. рисунок). Найти границы применимости расчета.

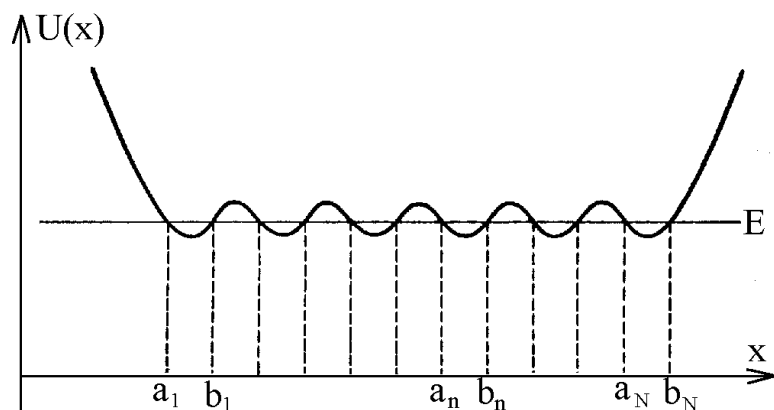


5.8. В действительности изменение потенциальной энергии для электрона вблизи поверхности металла (см. задачу 5.7)

происходит непрерывно. Так закон  $U(x) = -\frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 x}$  (метод

зеркального отображения) действует на больших расстояниях от поверхности (см. рис.). Определить коэффициент прохож-

дения  $D$  электронов через поверхность металла с учетом этого закона в квазиклассическом приближении.

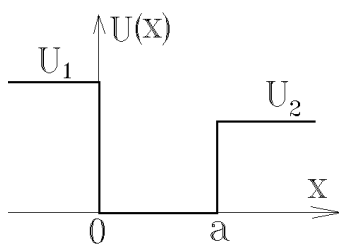


5.9. Потенциальное поле  $U(x)$  для некоторой частицы имеет вид  $N$  одинаковых потенциальных ям, разделенных одинаковыми потенциальными барьерами (см. рисунок). Считая выполненным условие квазиклассичности, определить уровни энергии в поле  $U(x)$ .

5.10. Частица с массой  $m$  и с энергией  $E$  пролетает над одномерной прямоугольной

потенциальной ямой ширины  $a$  и глубины  $U_0$ . Определить в квазиклассическом приближении условие абсолютной прозрачности этой ямы.

## Потенциальные барьеры и потенциальные ямы:



6.1. Определить уровни энергии и волновые функции частицы, находящейся в несимметричной потенциальной прямоугольной одномерной яме, изображенной на рисунке. В частности, рассмотреть случай  $U_1 = U_2$ .

6.2. Показать, что для частицы, находящейся в одномерной прямоугольной потенциальной яме ширины  $0 \leq x \leq a$  с бесконечно высокими стенками, имеют место следующие соотношения для средних величин

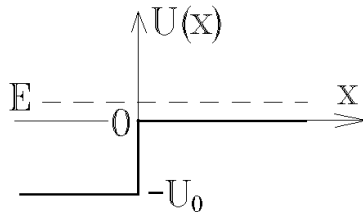
$$\langle x \rangle = \frac{a}{2}, \quad \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \frac{a^2}{12} \left( 1 - \frac{6}{n^2 \pi^2} \right).$$

Показать, что для больших значений  $n$  последний результат совпадает с соответствующим классическим.

6.3. Состояние частицы в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме, стенки которой расположены при  $x = 0$  и  $x = a$ , описывается волновой функцией

$\psi(x) = Ax(a - x)$ . Найти для нее распределение по энергиям, среднюю энергию  $\langle E \rangle$  и  $\langle \Delta E^2 \rangle$ .

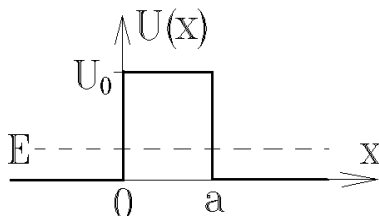




6.4. При изучении эмиссии электронов из металла надо принять во внимание, что электроны с энергией  $E$ , достаточной для выхода из металла, будут, согласно квантово-механическим свойствам, отражаться от его границы. Рассматривая одномерную модель с потенциальной энергией  $U(x) = -U_0$  при  $x < 0$  (для электрона внутри металла) и  $U(x) = 0$  при  $x > 0$  (для электрона вне металла, см. рисунок), определить коэффициент отражения электрона с энергией  $E > 0$  от поверхности металла.

6.5. Частица двигалась в положительном направлении оси  $x$  с отрицательной энергией  $E < 0$  и встретила потенциальный порог (ступеньку) изображенную на рисунке к предыдущей задаче 6.4. Определить волновую функцию и вычислить плотность тока отраженной и прошедшей волн. Найти коэффициент прохождения и отражения частиц от барьера.

6.6. Определить коэффициент прохождения частицы с энергией  $E < U_0$  через прямоугольный потенциальный барьер высоты  $U_0$ , изображенный на рисунке, а также коэффициент надбарьерного отражения от барьера в случае  $E > U_0$ .

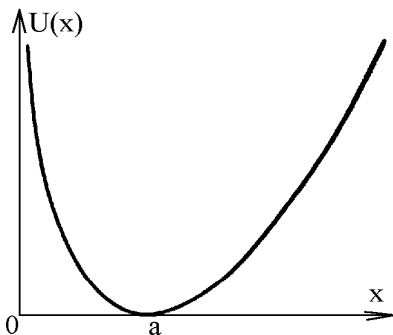


6.7. Рассмотреть поведение частицы в следующем потенциальном поле:  $U(x) = \begin{cases} \infty & \text{при } x \leq 0, \\ 0 & \text{при } 0 \leq x \leq a \text{ и } x \geq b, \\ U_0 & \text{при } a \leq x \leq b. \end{cases}$  От-

речь идет о случае  $E < U_0$ . Исследовать волновую функцию частицы, когда амплитуда во внутренней области ( $0 \leq x \leq a$ ) гораздо меньше, чем во внешней ( $x \geq b$ ).

6.8. Найти уровни энергии и волновые функции частицы в одномерной кулоновской потенциальной яме, задаваемой потенциальной энергией  $U(x) = -\frac{kq^2}{|x|}$ .

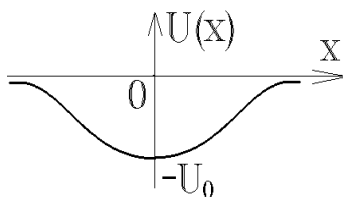
6.9. Определить волновые функции заряженной частицы в однородном поле с потенциальной энергией  $U(x) = -Fx$ .



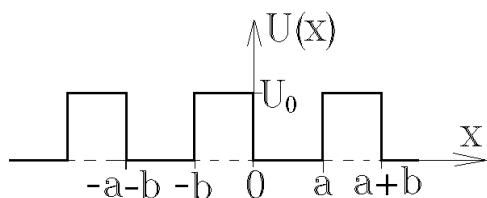
6.10. Найти волновые функции и уровни энергии частицы в

поле с потенциальной энергией  $U(x) = U_0 \left( \frac{a}{x} - \frac{x}{a} \right)^2$ ,

$x > 0$  (одномерная потенциальная яма, изображенная на рисунке), и показать, что энергетический спектр совпадает со спектром одномерного осциллятора.



6.11. Определить уровни энергии для частицы, находящейся в потенциальном поле  $U(x) = -\frac{U_0}{ch^2(x/a)}$ , изображенном на рисунке.



6.12. Определить зоны разрешенной энергии для частицы, движущейся в периодическом одномерном потенциальном поле, изображенном на рисунке. Исследовать предельный случай  $U_0 \rightarrow \infty$ ,  $b \rightarrow 0$  при условии, что  $U_0 b = \text{const}$ .

6.13. Слева на потенциальный  $\delta$ -образный

барьер  $U(x) = \frac{\hbar^2}{m} \Omega \delta(x)$  падает поток частиц с энергией  $E$ . Показать, что наличие барьера приводит к появлению разбегающейся в обе стороны от него "рассеянной волны".

## Квантовый гармонический осциллятор:

7.1. Гамильтониан одномерного осциллятора равен  $\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2}$ , где  $\hat{p}_x$  и  $\hat{x}$  удовлетворяют перестановочному соотношению  $\hat{p}_x \hat{x} - \hat{x} \hat{p}_x = -i\hbar$ . Определить нормированные волновые функции и уровни энергии осциллятора.

7.2. Частица движется в потенциальном поле  $U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$  (одномерный осциллятор). Определить вероятность нахождения частицы вне классических границ для основного состояния.

7.3. Найти уровни энергии и волновые функции одномерного гармонического осциллятора, помещенного в постоянное электрическое поле  $\vec{E}$ . Заряд частицы  $q$ .

7.4. Найти уровни энергии трехмерного гармонического осциллятора с потенциальной энергией  $U(x, y, z) = \frac{k_1 x^2}{2} + \frac{k_2 y^2}{2} + \frac{k_3 z^2}{2}$ .

7.5. Одномерный гармонический осциллятор находится на  $n$ -м уровне энергии. Найти для него  $\langle x^2 \rangle$  и среднюю потенциальную энергию.

## Частица в центрально-симметричном поле:

8.1. Рассмотреть решение уравнения Шредингера для нейтрона с массой  $m$ , находящегося в сферически-симметричной потенциальной яме радиуса  $a$ , задаваемой потенциальной энергией  $U(r) = \begin{cases} -U_0 & \text{при } r \leq a, \\ 0 & \text{при } r > a \end{cases}$  (поле ядра). Определить условие, при котором в яме может существовать единственный разрешенный уровень энергии для такого нейтрона.

8.2. Решить уравнение Шредингера для частицы в бесконечно глубокой сферически симметричной потенциальной яме, задаваемой потенциальной энергией

$$U(r) = \begin{cases} 0 & \text{при } r < a, \\ \infty & \text{при } r > a. \end{cases} \quad \text{Рассмотреть случай } l = 0.$$

8.3. Решить уравнение Шредингера для сферически симметричного трехмерного осциллятора с потенциальной энергией  $U(x, y, z) = \frac{m\omega^2}{2} r^2$ . Сравнить с результатами решения задачи 7.4.

8.4. Электрон находится в атоме водорода в основном состоянии. Определить для этого случая средние значения величин  $\langle r \rangle$ ,  $\langle r^2 \rangle$  и показать, что наиболее вероятное значение радиуса электронной орбиты равно  $r_0 = \frac{\hbar^2}{kme^2}$ .

8.5. Показать, что в основном состоянии атома водорода следующие средние значения равны: а)  $\langle 1/r \rangle = 1/r_0$ ; б)  $\langle 1/r^2 \rangle = 2/r_0^2$ , где  $r_0$  — наиболее вероятное значение радиуса электронной орбиты.

8.6. Электрон в кулоновском поле ядра заряда  $+Ze$  находится в основном состоянии. Показать, что средний электростатический потенциал в пространстве, создаваемый ядром и электроном, равен

$$\langle \phi \rangle = \frac{ke(Z-1)}{r} + ke \left( \frac{Z}{r_0} + \frac{1}{r} \right) e^{-2Zr/r_0}, \text{ где } r_0 = \frac{\hbar^2}{kme^2}.$$

8.7. Считая, что нуклон в легком ядре движется в усредненном потенциальном поле вида  $U(r) = -U_0 + \frac{m\omega^2}{2}r^2$ , определить число частиц одного сорта (нейтронов или протонов) в заполненных оболочках. Под оболочкой следует понимать совокупность состояний с одним и тем же значением энергии.

8.8. Взаимодействие между протоном и нейтроном можно приближенно описать потенциалом  $U(r) = -Ae^{-r/\alpha}$ . Найти волновую функцию основного состояния ( $l=0$ ). Найти энергию связи дейтрона, если  $A = 100$  МэВ,  $\alpha = 9,97 \cdot 10^{-16}$  м.

8.9. Считая, что постоянная  $\alpha$ -распада  $\lambda$  и коэффициент прозрачности барьера  $D$  связаны соотношением  $\lambda = nD$ , вычислить  $\lambda$ , если модель потенциала задается следующим образом:  $U(r) = -U_0$  при  $r < r_0$ , а при  $r \geq r_0$

$\alpha$ -частицы взаимодействуют с ядром, заряд которого  $+Ze$ , по закону Кулона. Принять, что  $r_0 \ll \frac{2kZe^2}{E}$ .

## Операторы момента импульса:

9.1. Выразить результат преобразования скалярной функции  $f(\vec{r})$  при бесконечно малом вращении системы координат через операторы момента импульса.

9.2. Получить выражения для операторов  $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$  в сферических координатах, исходя из того, что  $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$  являются операторами бесконечно малого поворота.

9.3. Непосредственным вычислением в координатном представлении проверить, что для системы из  $N$  частиц имеют место перестановочные соотношения

$[\hat{L}_x, Y] = -Z, [\hat{L}_x, \hat{L}_y] = -\hat{L}_z$ , где  $\hat{L}$  — оператор момента импульса системы в целом, а  $X, Y, Z$  — координаты ее центра масс.

9.4. Полный момент частицы равен  $J$ , проекция момента на ось  $z$  имеет максимальное значение. Определить вероятности различных значений проекции момента на направление, образующее угол  $\theta$  с осью  $z$ .

## Импульсное и энергетическое представления:

- 10.1. Частица находится в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме (см. задачу 6.2.) в состоянии, отвечающем энергии  $E_2 = \frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2}$ . Определить вероятность того, что она имеет импульс в интервале от  $p$  до  $p + dp$ . Найти распределение вероятностей различных значений импульса для частицы, находящейся в этой яме в  $n$ -м энергетическом состоянии.
- 10.2. Решить уравнение Шредингера, т.е. найти волновую функцию для одномерного движения частицы вблизи точки поворота  $x = x_1$ , где  $E - U(x) = \alpha(x - x_1)$ ,  $\alpha = \text{const}$ .
- 10.3. Определить выражения операторов импульса и координаты в  $p$ -представлении, и вычислить коммутатор этих операторов.

## Матричные элементы и теория возмущений:

- 11.1. Найти собственные значения энергии одномерного гармонического осциллятора и матричные элементы координаты и импульса в энергетическом представлении. Найти также матричные элементы операторов  $\hat{p}_x$  и  $\hat{x}$  этого осциллятора в энергетическом представлении.
- 11.2. Найти разрешенные уровни энергии одномерного агармонического осциллятора с потенциальной энергией  $U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \alpha x^3 + \beta x^4$ , где  $\alpha, \beta$  — малые константы.
- 11.3. Определить матричные элементы дипольного момента,  $x^2$  и  $p_x$  для частицы в бесконечно глубокой одномерной прямоугольной потенциальной яме, расположенной в области  $-\frac{a}{2} \leq x \leq +\frac{a}{2}$ .
- 11.4. Жесткий плоский ротор с моментом инерции  $I$  и дипольным моментом  $\vec{p}_e$  вращается в слабом однородном электрическом поле с напряженностью  $\vec{E}$ . Вычислить поправки к энергии ротора в первом и втором приближениях.
- 11.5. Некоторый уровень энергии  $E$  двукратно вырожден и соответствует двум ортогональным волновым функциям  $\psi_1$  и  $\psi_2$ . Известно, что в начальный момент  $t = 0$  система находится в состоянии с волновой функцией  $\psi_1$ , и включается слабое внешнее возмущение с оператором возмущения  $\hat{V}$ , под действием которого система может перейти в состояние с волновой функцией  $\psi_2$ . Найти вероятность того, что в момент времени  $t$  система окажется в состоянии с волновой функцией  $\psi_2$ .
- 11.6. Атом водорода в первом возбужденном состоянии ( $n = 2$ ) помещают во внешнее однородное электрическое поле с напряженностью  $\vec{E}$ . Определить расщепление уровней энергии под действием этого поля (линейный эффект Штарка).
- 11.7. Показать: что для атомов первой группы, у которых уровни энергии  $E_{nl}$  определяются значениями квантовых чисел  $n$  и  $l$ , линейный эффект Штарка (т.е. расщепление линий во внешнем однородном электрическом поле) отсутствует. Показать, что при помещении атома водорода в однородное электрическое поле энергия состояния с квантовыми числами  $l = n - 1$ ,  $m = n - 1$  в линейном по полю приближении не изменяется, а состояния, отличающиеся только знаком проекции момента, имеют одну и ту же энергию.

## Вариационные методы решения квантовомеханических задач:

12.1. Параметризуя в основном состоянии атома водорода волновую функцию в виде  $\psi = Ae^{-\alpha r}$ , где  $\alpha$  – параметр, вычислить с помощью метода Ритца значение энергии в этом состоянии.

12.2. Используя результат предыдущей задачи, и параметризуя волновую функцию электрона в атоме водорода в  $2s$  – состоянии в виде  $\psi_2 = B \left( 1 + \gamma \frac{r}{r_1} \right) e^{-\frac{\beta r}{r_1}}$ , где  $\beta, \gamma$  – параметры, вычислить с помощью метода Ритца энергию электрона в этом состоянии.

## Операторы спина:

13.1. Найти волновые функции системы из двух частиц со спином,  $1/2$ , которые являются собственными функциями коммутирующих операторов квадрата и проекции на ось  $z$  суммарного спина.

13.2. Вычислить скалярное произведение спинов двух частиц в триплетном и синглетном состояниях. Спин частицы  $\hbar/2$ .

13.3. Система состоит из двух частиц, Спин одной равен  $1/2$ , другой  $0$ . Показать: что при любом законе взаимодействия этих частиц орбитальный момент импульса является сохраняющейся величиной.

13.4. Вычислить квадрат проекции спина  $\hbar/2$  на произвольное направление.

13.5. Найти собственные функции и собственные значения операторов  $\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$  и  $\hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$  (спиновые матрицы Паули).

13.6. Наиболее общий вид спиновой функции частицы со спином  $1/2$  в “ $z$ ”-представлении есть  $\begin{cases} \psi_1 = e^{i\alpha} \cos \delta, \\ \psi_2 = e^{i\beta} \sin \delta. \end{cases}$  Эта функция описывает такое состояние частицы, в котором вероятность значения проекции спина  $+1/2$  (или  $-1/2$ ) на ось  $z$  равна  $\cos^2 \delta$  (или  $\sin^2 \delta$ ). Каков будет результат измерения проекции спина на совершенно произвольное направление ?

## Движение частицы во внешнем электромагнитном поле:

14.1. Релятивистский бесспиновый  $\pi^-$  – мезон с массой  $m$  и зарядом  $-e$  движется в поле тяжелого кулоновского центра с зарядом  $+Ze$ . Вычислить разрешенные уровни энергии такого “атома”.

14.2. Водородоподобный атом помещен в слабое внешнее однородное магнитное поле с индукцией  $\vec{B}$ . Найти возникшее расщепление энергетических уровней, если

$$\frac{e\hbar B}{2m} \ll |\Delta E_{JJ'}|, \text{ где } \Delta E_{JJ'} - \text{расстояние между уровнями тонкой структуры.}$$

14.3. На сколько подуровней расщепится первоначально вырожденный уровень энергии, соответствующий водородоподобному атому с квантовыми числами  $n, l$ , который по-

мещают во внешнее **сильное** однородное магнитное поле с индукцией  $\vec{B}$ ? Каким будет величина этого расщепления?

14.4. Показать, что в случае наличия магнитного поля для операторов компонент скорости выполняются следующие правила коммутации:  $\hat{v}_x \hat{v}_y - \hat{v}_y \hat{v}_x = \frac{iq\hbar}{m^2} B_z$ ;

$$\hat{v}_y \hat{v}_z - \hat{v}_z \hat{v}_y = \frac{iq\hbar}{m^2} B_x; \quad \hat{v}_z \hat{v}_x - \hat{v}_x \hat{v}_z = \frac{iq\hbar}{m^2} B_y.$$

14.5. Определить уровни энергии свободного электрона, движущегося в однородном магнитном поле с индукцией  $\vec{B}$ , направленном вдоль оси  $z$ .

14.6. Определить энергетический спектр заряженной частицы, движущейся в однородном электрическом и однородном магнитном полях, направления напряженности  $\vec{E}$  и индукции  $\vec{B}$  которых взаимно перпендикулярны.

14.7. Составить вектор плотности тока для частицы с зарядом  $q$  и массой  $m$ , движущейся в магнитном поле.

14.8. На электрон, помещенный в центральное поле, дополнительно воздействует однородное магнитное поле с индукцией  $B$ . Определить стационарные состояния электрона и найти поправки к уровням энергии. Считать электрон нерелятивистским, и не учитывать его спин.

14.9. Пользуясь теорией возмущения, найти поправку к уровням энергии атома водорода за счет релятивистской зависимости массы от скорости (учесть член порядка  $v^2/c^2$ ).

14.10. Взаимодействие собственного магнитного момента электрона,

$$\vec{p}_{ms} = -g \frac{e}{mc} \vec{S}, \text{ с его собственным орбитальным моментом } \vec{L} \text{ описывается в гамильто-}$$

ниане членом вида  $H' = \frac{g}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dU(r)}{dr} (\vec{S} \cdot \vec{L})$ . Определить обусловленное этим взаимодействием расщепление энергетических уровней.

## Многоэлектронный атом:

15.1. Используя теорию возмущений, вычислить энергию гелиеподобного атома в основном состоянии. Пользуясь полученной формулой определить энергию ионизации атома гелия в основном состоянии.

15.2. Вычислить энергию гелиеподобного атома, используя метод Ритца (параметризовать волновую функцию этого состояния в виде  $\psi = \frac{\alpha^3}{\pi} e^{-\alpha(r_1+r_2)}$ , где  $r_1, r_2$  — координаты электронов, параметр). Получить энергию ионизации атома гелия и сравнить с результатом предыдущей задачи.

15.3. Указать возможные значения полного момента у состояний  $^1S, ^3S, ^3P, ^2D, ^4D$ .

15.4. Какие состояния (термы) могут осуществляться для двух электронов: а)  $nsn's$ ; б)  $nsn'p$ ; в)  $nsn'd$ ; г)  $npn'p$ .

15.5. Указать возможные термы следующих конфигураций: а)  $(np)^3$ ; б)  $(nd)^2$ ; в)  $ns(n'p)^4$ .

15.6. Определить четность основных термов элементов:  $K, Zn, B, C, N, O, Cl$ .

15.7. Найти пределы изменения множителя Ланде  $g$  при заданных значениях  $L$  и  $S$ .

15-8. Вывести формулу для оператора спин-орбитального взаимодействия для нуклона в атомном ядре, и с ее помощью рассчитать расщепление энергетического уровня нуклона, находящегося в подоболочке с квантовым числом  $l$ , за счет спин-орбитального взаимодействия.

### Спин в магнитном поле:

16.1. Рассмотреть поведение магнитного момента электрона во внешнем магнитном поле  $\vec{B} = \vec{i} B_1 \cos \omega t + \vec{j} B_1 \sin \omega t + \vec{k} B_0$ , где  $B_0, B_1 = \text{const}$ ,  $\omega = \frac{2\mu_B B_0}{\hbar}$ . Движение электрона не учитывать. Определить средние значения проекций магнитного момента электрона на оси координат в данной задаче.

### Изменение состояния квантовомеханической системы под внешним воздействием, зависящим от времени:

17.1. Тяжелая частица массы  $m$  с зарядом  $q$  пролетает мимо атома водорода на расстоянии  $a$ , практически не отклоняясь от прямой траектории. Атом первоначально находился в основном состоянии, а на большом удалении частица имела скорость  $v_0$ . Получить формулу для вероятности перехода атома водорода в возбужденное состояние с квантовым числом  $n$  после пролета частицы. Рассмотреть случаи большой и малой скорости  $v_0$ .

17.2. Ядро водородоподобного иона с зарядом  $+Ze$ , находившегося в основном состоянии ( $n=1$ ), испытало  $\beta$ -распад. Найти вероятность, что образовавшийся атом окажется в первом возбужденном состоянии ( $n=2$ ). Вычислить эту вероятность для иона  $He$  и иона  $Li$ .

### Рассеяние частиц.

18.1. Пучок нейтронов рассеивается на атомном ядре, для которого потенциальная энергия взаимодействия с нейтроном  $U(r) = \begin{cases} -U_0 & \text{при } r < a, \\ 0 & \text{при } r > a, \end{cases}$   $U_0 \approx 60$  МэВ. Найти условие применимости борновского приближения в теории рассеяния.

18.2. В первом борновском приближении определить сечение рассеяния нейтронов на атомном ядре, для которого  $U(r) = \begin{cases} -U_0 & \text{при } r \leq a, \\ 0 & \text{при } r > a, \end{cases}$  где  $a$  — радиус ядра. Показать, что условие применимости борновского приближения выполнено.

18.3. Показать, что в первом борновском приближении при рассеянии электронов на точечном кулоновском центре получается классическая формула Резерфорда.

18.4. В первом борновском приближении вычислить дифференциальное сечение рассеяния электронов на ядрах, считая, что плотность электрического заряда ядра  $\rho(r)$  сферически симметрична. Полученные результаты применить к случаю, когда заряд распределен по объему ядра с постоянной плотностью  $\rho = \rho_0$  и вычислить форм-фактор рассеивающего ядра.

18.5. В первом борновском приближении вычислить дифференциальное сечение рассеяния электронов на экранированном кулоновском потенциале:  $U(r) = -\frac{Ze^2}{r}e^{-\alpha r}$ , где  $\alpha = \text{const}$ .

18.6. Рассчитать дифференциальное сечение рассеяния в поле отталкивания  $U = A/r^2$  в борновском приближении и согласно классической механике. Определить пределы применимости полученных формул.

18.7. Используя борновское приближение, найти дифференциальное и полное сечение упругого рассеяния быстрых электронов:

а) атомом водорода; б) атомом гелия.

18.8. Рассчитать сечение упругого рассеяния электрона на электроне и  $\alpha$  — частицы на  $\alpha$  — частице.

## Молекула:

19.1. Найти формулу, определяющую электронные термы при взаимодействии атома гелия с атомом водорода при условии, что оба атома находятся в основных состояниях.

19.2. Определить момент инерции и расстояние между ядрами в молекуле  $H^1Cl^{35}$ , если разность частот двух соседних линий во вращательно-колебательной (инфракрасной) полосе  $H^1Cl^{35}$  равна  $\Delta\nu = 20,9 \text{ с}^{-1}$ . Вычислить соответствующее  $\Delta\nu$  в спектре  $DCl$ .

19.3. Вычислить отношение разностей энергии между двумя первыми вращательными и двумя первыми колебательными уровнями молекулы HF. Момент инерции молекулы HF равен  $I = 1,35 \cdot 10^{-40} \text{ г} \cdot \text{см}^2$ , а частота колебаний  $\Delta\nu_{\text{кол}} = 3987 \text{ с}^{-1}$ .

19.4. Определить энергию диссоциации молекулы  $D_2$ , если энергия диссоциации и нулевая энергия колебания молекулы  $H_2$  равняются 4,46 эв и 0,26 эв соответственно.

19.5. Для аппроксимации хода кривой потенциальной энергии двухатомной молекулы часто используется функция  $U = D(1 - e^{-2\beta\xi})^2$ ;  $\xi = (r - a)/a$ , предложенная Морзе. Определить энергетический спектр колебаний при  $K = 0$ .

19.6. Молекулы, имеющие две или несколько осей симметрии третьего или более высокого порядка (например,  $\text{CH}_4$ ). Представляют сферический волчок. У таких молекул эллипсоид инерции вырождается в сферу  $A = B = C$ . Определить уровни энергии сферического волчка.

19.7. Определить зеемановское расщепление терма двухатомной молекулы; терм относится к случаю  $a$ . Магнитное поле предполагается малым, т.е. энергия взаимодействия спина с внешним магнитным полем мала по сравнению с разностью энергий между последовательными вращательными уровнями.

19.8. Определить расщепление в электрическом поле терма двухатомной молекулы, имеющей постоянный дипольный момент  $\vec{p}_e$ . Расщепляемый терм относится к случаю  $a$ .

19.9. При помощи теории возмущений определить закон взаимодействия двух невозбужденных атомов водорода, находящихся на большом расстоянии  $R$  друг от друга.

19.10. Рассмотреть прямым вариационным методом задачу дейтрона. Потенциальная энергия взаимодействия между протоном и нейтроном задается как  $U(r) = -Ae^{-r/\alpha}$ . В качестве приближенной волновой функции взять  $\psi = Be^{-\kappa r/2\alpha}$ . Найти связь между параметрами  $A$  и  $\alpha$ , при которой для энергии  $E$  получается экспериментально установленное значение  $E = -2,23 \text{ МэВ}$  (считать, что  $\alpha \approx 2 \text{ ферми}$ ).



19.11. Вращение большого класса молекул можно трактовать как вращение твердого тела, если не учитывать колебания ядер и движения электронов. Пусть молекула имеет форму симметричного волчка с моментом инерции  $I_1$  относительно оси молекулы и моментом инерции  $I_2$  относительно любой из перпендикулярных осей: проходящих через ее центр масс. Исходя из классической функции Гамильтона, получить уравнение Шредингера для свободных вращений и определить собственные значения энергии.

19.12. Два атома водорода, находящиеся в *основном состоянии*, расположены на расстоянии  $R$  друг от друга. Считая ядра атомов покоящимися, показать, что в первом порядке теории возмущений энергия взаимодействия атомов равна нулю, и что учет второго порядка теории возмущений приводит к силам притяжения Ван-дер-Ваальса. В той части гамильтониана, которая ответственна за взаимодействие, оставить только главные члены, пропорциональные наинизшей отрицательной степени  $R$ .

19.13. Найти энергию основного состояния и равновесный размер нейтральной молекулы водорода.

## Методы описания электронной подсистемы в квантовой теории конденсированной среды (твердого тела)

20.1. Получить выражение для спектра возмущенных стационарных состояний ионной и электронной подсистем для конденсированной среды методом адиабатических приближений. Как запишутся соответствующие выражения при использовании адиабатического принципа Борна-Оппенгеймера?

20.2. С помощью метода Хартри-Фока получить одночастичное уравнение Шредингера, описывающее спектр электронной подсистемы в случае кристаллической решетки твердого тела. К какому виду оно приводится в приближении слабой связи?

20.3. Доказать теорему Блоха и получить блоховские волновые функции, описывающие спектр энергии в одномерном случае.