НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ
Факультет физики

Домашнее задание

Квантовая механика, неделя 15

Задание выполнил студент 2 курса
Захаров Сергей Дмитриевич

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ

Москва
2020

Задача 1

Для основного состояния атома водорода известна волновая функция (в размерных единицах):

$$\psi_0(r) = \frac{e^{-r/a_B}}{\sqrt{\pi a_B^3}} \tag{1}$$

Здесь a_B — боровский радиус.
В таком случае:

$$\langle r^2 \rangle = \frac{1}{\pi a_B^3} \int\limits_0^\infty dr \int\limits_0^\pi d\theta \int\limits_0^{2\pi} d\varphi \; e^{-r/a_B} \cdot r^2 \cdot e^{-r/a_B} \cdot r^2 \cdot \sin\theta = \frac{4}{a_B^3} \int\limits_0^\infty dr \; r^4 \cdot e^{-2r/a_B} =$$
$$= \frac{4}{a_B^3} \cdot \frac{4! a_B^5}{2^5} = \boxed{3a_B^2}$$

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{1}{\pi a_B^3} \int\limits_0^\infty dr \int\limits_0^\pi d\theta \int\limits_0^{2\pi} d\varphi \; e^{-r/a_B} \cdot \frac{1}{r} \cdot e^{-r/a_B} \cdot r^2 \cdot \sin\theta = \frac{4}{a_B^3} \int\limits_0^\infty dr \; r \cdot e^{-2r/a_B} = \boxed{\frac{1}{a_B}}$$

$$\langle \hat{\mathbf{p}}^2 \rangle = \frac{1}{\pi a_B^3} \int\limits_0^\infty dr \int\limits_0^\pi d\theta \int\limits_0^{2\pi} d\varphi \; e^{-r/a_B} \cdot \left(-\hbar^2 \cdot \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \left[r e^{-r/a_B} \right] \right) \cdot r^2 \cdot \sin\theta =$$
$$= \frac{4\hbar^2}{a_B^3} \int\limits_0^\infty dr \; e^{-r/a_B} \left(\frac{r e^{-r/a_B}}{a_B^2} - \frac{2e^{-r/a_B}}{a_B} \right) \cdot r = \boxed{\frac{\hbar^2}{a_B^2}}$$

Последние интегралы берутся по частям, кроме того, они широко известны и посчитаны, например, на Wiki, поэтому приводить их взятие нужным не считаю.

Задача 2

Вне ядра потенциал, создаваемый им, совпадает с кулоновским и равняется $\varphi_o = e/r$. Внутри же ядра создается потенциал φ_i, который отличается от кулоновского потенциала на величину

$$\delta\varphi = \varphi_i - e/r \tag{2}$$

Это отличие в свою очередь будет определять интересующее нас возмущение, которое задается формулой $V(r) = -e\delta\varphi(r)$.

Согласно теории возмущений, искомый нами сдвиг по энергии будет определяться формулой:

$$\Delta E_{1s} = \int\limits_V dV \; \psi_0^\dagger(r) V(r) \psi_0(r)$$

С учетом того, что радиус ядра много меньше радиуса атома Бора, мы можем заменить в интеграле $\psi_0(r)$ на $\psi_0(0)$, т.к. она мало меняется. В таком случае мы получим следующее:

$$\Delta E_{1s} \approx -e\psi_0^\dagger(0)\psi_0(0) \int\limits_V dV \; \delta\varphi \tag{3}$$

Чтобы взять последний интеграл воспользуемся фокусом: $\Delta r^2 = 6$. Тогда мы можем переписать:

$$\int\limits_V dV\ \delta\varphi = \frac{1}{6}\int\limits_V dV\ \delta\varphi\Delta r^2 = \frac{1}{6}\int\limits_V dV\ r^2\Delta\delta\varphi$$

Переход к последнему равенству произведен по частям.

Расписав $\delta\varphi$ по формуле (2) получим:

$$\Delta\delta\varphi = -4\pi\rho + 4\pi e\delta^3(r) = -4\pi(\rho - \delta^3(r))$$

Здесь использовано уравнение Пуассона $\Delta\varphi_i = -4\pi\rho$ и лапласиан функции $1/r$: $\Delta 1/r = -4\pi\delta^3(r)$. ρ — объемная плотность заряда, в нашем случае она равна:

$$\rho = \frac{e}{4/3\pi r_0^3} = \frac{3e}{4\pi r_0^3}$$

Подставляя в интеграл:

$$-\frac{1}{6}\int\limits_V dV\ 4\pi r^2(\rho - \delta^3(r)) = -\frac{e}{2r_0^3}\int\limits_V dV\ r^2 = -\frac{e}{2r_0^3}\int\limits_0^{r_0} dr \int\limits_0^{\pi} d\theta \int\limits_0^{2\pi} d\varphi\ r^4\sin\theta = -\frac{2\pi r_0^2 e}{5}$$

Теперь, согласно формуле (3) и подставляя $\psi_0(0)$ из формулы (1):

$$\Delta E_{1s} = \frac{2\pi r_0^2 e^2}{5}\cdot\frac{1}{\pi a_B^3} = \boxed{\frac{2r_0^2 e^2}{5a_B^3}}$$

Задача 3