

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):

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

Здесь a_B — боровский радиус.

В таком случае:

$$\begin{aligned} \langle r^2 \rangle &= \frac{1}{\pi a_B^3} \int_0^\infty dr \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi e^{-r/a_B} \cdot r^2 \cdot e^{-r/a_B} \cdot r^2 \cdot \sin \theta = \frac{4}{a_B^3} \int_0^\infty dr r^4 \cdot e^{-2r/a_B} = \\ &= \frac{4}{a_B^3} \cdot \frac{4! a_B^5}{2^5} = \boxed{3a_B^2} \\ \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle &= \frac{1}{\pi a_B^3} \int_0^\infty dr \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi e^{-r/a_B} \cdot \frac{1}{r} \cdot e^{-r/a_B} \cdot r^2 \cdot \sin \theta = \frac{4}{a_B^3} \int_0^\infty dr r \cdot e^{-2r/a_B} = \boxed{\frac{1}{a_B}} \\ \langle \hat{\mathbf{p}}^2 \rangle &= \frac{1}{\pi a_B^3} \int_0^\infty dr \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi e^{-r/a_B} \cdot \left(-\hbar^2 \cdot \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} [r e^{-r/a_B}] \right) \cdot r^2 \cdot \sin \theta = \\ &= \frac{4\hbar^2}{a_B^3} \int_0^\infty dr e^{-r/a_B} \left(\frac{r e^{-r/a_B}}{a_B^2} - \frac{2e^{-r/a_B}}{a_B} \right) \cdot r = \boxed{\frac{\hbar^2}{a_B^2}} \end{aligned}$$

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

Проверим теперь теорему Вириала: согласно ей для кулоновского поля мы должны иметь:

$$2\langle T \rangle_n = -\langle U \rangle_n$$

Подставляя $T = \hat{\mathbf{p}}^2/(2m)$ и $U = -e^2/r$ и вспоминая, чему равен боровский радиус $a_B = \hbar^2/(me^2)$, получаем:

$$2 \cdot \left\langle \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \right\rangle = - \left\langle -\frac{e^2}{r} \right\rangle \Leftrightarrow \frac{\hbar^2}{ma_B^2} = \frac{e^2}{a_B} \Leftrightarrow \frac{e^2}{a_B} = \frac{e^2}{a_B}$$

Видимо, что оно теорема приводит нас к тождественному равенству, т.е. она выполняется.

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

$$\delta\varphi = \varphi_i - e/r \quad (2)$$

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:

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

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

$$\Delta E_{1s} \approx -e\psi_0^\dagger(0)\psi_0(0) \int_V dV \delta\varphi \quad (3)$$

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

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

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:

$$-\frac{1}{6} \int_V dV 4\pi r^2 (\rho - \delta^3(r)) = -\frac{e}{2r_0^3} \int_V dV r^2 = -\frac{e}{2r_0^3} \int_0^{r_0} dr \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi r^4 \sin\theta = -\frac{2\pi r_0^2 e}{5}$$

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

Для начала запишем волновые функции, которыми мы будем пользоваться (будем представлять их в виде $\psi = R_{nl}(r) \cdot Y_l^m$, где R — радиальная часть):

$$\begin{aligned}
|2s0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2a_B^3}} \cdot \left(1 - \frac{r}{2a_B}\right) \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi}} e^{-r/2a} \\
|2p0\rangle &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{1}{\sqrt{24a_B^5}} r e^{-r/2a} \cos \theta \\
|2p1\rangle &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{1}{\sqrt{24\pi a_B^5}} r e^{-r/2a} \sin \theta e^{i\varphi} \\
|2p-1\rangle &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{1}{\sqrt{24\pi a_B^5}} r e^{-r/2a} \sin \theta e^{-i\varphi}
\end{aligned}$$

Расположим ось z в направлении электрического поля. В таком случае, возмущение будет выражаться следующим образом:

$$V = e\mathcal{E}r \cos \theta$$

Для того, чтобы найти поправки, нам надо будет рассматривать штуки вида $\langle 2lm | V | 2l'm' \rangle$. С точки зрения интеграла по θ мы в итоге получим пропорциональность интегралу вида:

$$I_{nm} = \int_0^\pi d\theta \sin^n \theta \cos^m \theta \quad (4)$$

При этом n может принимать значения 1, 2, 3; m может принимать значения 1, 2, 3. Один $\sin \theta$ приходит от перехода в сферические координаты. Один $\cos \theta$ — из формулы для возмущения V . Видно, что из имеющихся наборов ненулевым интеграл будет только в случае $n = 1, m = 2$ или $n = 2, m = 2$ (вариант $n = 2, m = 2$ нас потенциально тоже удовлетворяет, но он недостижим: см. волновые функции, равно как и вариант $n = 3, m = 2$).

Вариант $n = 1, m = 2$ соответствует интегралу $I_{12} = 2/3$. Интеграл берется с помощью формулы понижения степени, поэтому приводить это я не буду. Такая ситуация возможна при рассмотрении элемента $\langle 2s0 | V | 2p0 \rangle$ или транспонированного: $\langle 2p0 | V | 2s0 \rangle$.

Вариант $n = 2, m = 2$ соответствует интегралу $I_{22} = \pi/8$ и возникает при рассмотрении $\langle 2p1 | V | 2p0 \rangle$ (и транспонированного) и $\langle 2p-1 | V | 2p0 \rangle$ (и транспонированного). Однако рассмотрим теперь интеграл, который получится при этом с точки зрения интегрирования по φ . Он будет включать в себя интегрирование $e^{\pm i\varphi}$ в пределах $\varphi \in [0..2\pi]$. Оно по очевидным соотношениям даст нам 0, поэтому этот случай рассматривать смысла нет.

Посчитаем единственный по итогам интересующий нас элемент: $\langle 2s0 | V | 2p0 \rangle$

$$\begin{aligned}
\langle 2s0 | V | 2p0 \rangle &= \frac{\sqrt{3}e\mathcal{E}}{a_B^4 \cdot 4\pi\sqrt{48}} \cdot \int_0^\infty dr \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \left(1 - \frac{r}{2a_B}\right) \cdot e^{-r/a} \cdot r^4 \cos^2 \theta \sin \theta = \\
&= \frac{\sqrt{3}e\mathcal{E}}{a_B^4 \cdot 2\sqrt{48}} \cdot \int_0^\infty dr \int_0^\pi d\theta \left(1 - \frac{r}{2a_B}\right) \cdot e^{-r/a} \cdot r^4 \cos^2 \theta \sin \theta = \frac{e\mathcal{E}}{12a_B^4} \cdot \int_0^\infty dr \left(1 - \frac{r}{2a_B}\right) \cdot e^{-r/a} \cdot r^4 = \\
&= \frac{e\mathcal{E}}{12a_B^4} \cdot \int_0^\infty dr r^4 \cdot e^{-r/a} - \frac{e\mathcal{E}}{12a_B^4} \cdot \int_0^\infty dr \frac{r^5}{2a_B} \cdot e^{-r/a} = -3a_B e\mathcal{E}
\end{aligned}$$

Таким образом мы получаем, что матрица возмущения \mathcal{V} имеет следующий вид:

$$\mathcal{V} = \begin{pmatrix} 0 & -3a_B e\mathcal{E} & 0 & 0 \\ -3a_B e\mathcal{E} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5)$$

Найдем собственные числа этой матрицы: они оказываются равными 0 (двукратное) и $\pm 3a_B e\mathcal{E}$. Таким образом вырождение частично снимается: у нас оказываются три состояния: одно с энергией E_{20} — энергией, которая была у уровня изначально, без возмущения (вырождено с кратностью 2), одно с энергией $E_{20} + 3a_B e\mathcal{E}$ и одно с энергией $E_{20} - 3a_B e\mathcal{E}$.

Для нахождения правильных волновых функций найдем собственные вектора матрицы возмущения. Они окажутся равными:

$$u_1 = (0 \ 0 \ 1 \ 0) \quad u_2 = (0 \ 0 \ 0 \ 1) \quad u_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} (-1 \ 1 \ 0 \ 0) \quad u_4 = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \ 1 \ 0 \ 0) \quad (6)$$

Первые два вектора отвечают собственному значению, равному 0, третий — значению $3a_B e\mathcal{E}$, четвертый — собственному значению $-3a_B e\mathcal{E}$. Таким образом получается, что правильные волновые функции нулевого порядка оказываются равными:

$$\begin{aligned} \psi_{g1} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|2s0\rangle + |2p0\rangle) = \frac{1}{4\sqrt{\pi a_B^3}} e^{-r/2a} \cdot \left(1 - \frac{r}{2a_B} + \frac{r}{2a_B} \cdot \cos \theta \right) = \\ &= \frac{1}{4\sqrt{\pi a_B^3}} e^{-r/2a} \cdot \left(1 - \frac{r}{2a_B} \cdot [1 - \cos \theta] \right) \\ \psi_{g2} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|2p0\rangle - |2s0\rangle) = \frac{1}{4\sqrt{\pi a_B^3}} e^{-r/2a} \cdot \left(-1 + \frac{r}{2a_B} \cdot [1 + \cos \theta] \right) \\ \psi_{g3} &= |2p1\rangle = -\frac{1}{8\sqrt{\pi a_B^3}} \frac{r}{a_B} e^{-r/2a} \sin \theta e^{i\varphi} \\ \psi_{g4} &= |2p-1\rangle = \frac{1}{8\sqrt{\pi a_B^3}} \frac{r}{a_B} e^{-r/2a} \sin \theta e^{-i\varphi} \end{aligned}$$