Задание по курсу «Квантовая механика II»

Автор заметок: Хоружий Кирилл

От: *20 мая 2022 г.*

T15

По определению
$$W^\mu = -\frac{1}{2}\varepsilon^{\mu\nu\lambda\rho}p_\nu S_{\lambda\rho}, \qquad S_{ik} = \hbar\varepsilon_{ikl}s^l.$$
Тогда подставляя $\mu = 0$, находим
$$W^0 = -\frac{1}{2}\varepsilon^{0ijk}p_i\hbar\varepsilon_{jkn}s^n = -\hbar p_i s^i = \hbar\left(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{s}\right).$$
Теперь, с учетом $S_{0i} = i\,\mathrm{sign}(\mathfrak{s})s^i\hbar$, находим
$$\begin{aligned} W^i &= -\tfrac{1}{2}\varepsilon^{i0jk}p_0 S_{jk} - \varepsilon^{ij0k}p_j S_{0k} = \tfrac{1}{2}\varepsilon^{0ijk}p_0\hbar\varepsilon_{jkn}s^n - i\,\mathrm{sign}(\mathfrak{s})\varepsilon^{oijk}p_j s_k\hbar = \\ &= \hbar\left(p_0 s^i - i\,\mathrm{sign}(\mathfrak{s})\left[\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{s}\right]^i\right). \end{aligned}$$

T22

Уровни Ландау. Для частицы в постоянном магнитном поле гамильтониан запишется в виде
$$\hat{H} = \frac{\hat{\boldsymbol{\mathcal{P}}}^2}{2m} - \frac{\mu}{s}\hat{s}_z\mathcal{H} + \cancel{eA_0}, \qquad \hat{\mathcal{P}}^\alpha = -i\hbar\partial_\alpha - \frac{e}{c}A_\alpha.$$
Удобно зафиксировать калибровку в виде
$$A_x = -\mathcal{H}y, \quad A_y = A_z = 0.$$
Тогда гамильтониан можем записать в виде
$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x + \frac{e\mathcal{H}}{c}y\right)^2 + \frac{\hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m}.$$
Так как $[\hat{s}_z,\, H] = 0$, то может рассмотреть собственные состояния $\hat{s}_z$ и не думать про это:
$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad \Rightarrow \quad \psi = e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_z z)}\chi(y),$$
так как $[\hat{p}_x,\, \hat{H}] = [\hat{p}_z,\, \hat{H}] = 0$. Движение вдоль поля «не квантуется».

Подставляя предполагаемые вид функции в уравнение Шредингера, получаем дифференциальное уравнение на χ
$$\chi'' + \frac{2m}{\hbar^2}\left(\underbrace{\left(E + \tfrac{\mu\sigma}{s}\mathcal{H} - \tfrac{1}{2m}p_z^2\right)}_{E_{\mathrm{osc}} = \hbar\omega_{\mathcal{H}}(n+1/2)} - \tfrac{m}{2}\omega_{\mathcal{H}}^2(y-y_0)^2\right)\chi = 0,$$
где введены
$$y_0 \overset{\mathrm{def}}{=} -\frac{cp_x}{e\mathcal{H}}, \qquad \omega_{\mathcal{H}} \overset{\mathrm{def}}{=} \frac{|e|\mathcal{H}}{mc}.$$
Таким образом для уровней энергии частицы находим
$$E = \left(n + \tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega_{\mathcal{H}} + \frac{p_z^2}{2m} - \frac{\mu\sigma}{s}\mathcal{H},$$
что и называют уровнями Ландау. Подставляя $\mu/s = -|e|\hbar/mc$, можем написать уровни в виде
$$E = \left(n + \tfrac{1}{2} + \sigma\right)\hbar\omega_{\mathcal{H}} + \frac{p_z^2}{2m}.$$
Собственные функции можем написать в терминах полиномов Эрмита:
$$\chi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{a_H\sqrt{\pi}2^n n!}}\exp\left(-\frac{(y-y_0)^2}{2a_H^2}\right)H_n\left(\frac{y-y_0}{a_H}\right), \quad a_H = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_{\mathcal{H}}}}.$$

Кратность вырождения уровней. Пусть движение в плоскости xy ограничено большой, но конечной площадью $S = L_x L_y$. Тогда число различных дискретных значений p_x в интервале Δp_x можно найти в виде
$$N_{p_x}(\Delta p_x) = \frac{L_x}{2\pi\hbar}\Delta p_x.$$

Считая $0 < y_0 < L_y$ можем найти связь $\Delta p_x = eHl_y/c$, а значит число состояний для заданных n и p_z:

$$N_{n,p_z} = \frac{e\mathcal{H}S}{2\pi\hbar c}.$$

Добавляя ограничение по z в размере L_z, получаем число состояний в интервале Δp_z:

$$N_n = \frac{e\mathcal{H}V}{4\pi^2\hbar^2 x}\Delta p_z.$$

T23

Найдём уровни энергии и волновые функции стационарных состояний двух невзаимодействующих тождественных частиц в потенциальном ящике

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, \\ \infty, & x < 0,\ x > a. \end{cases}$$

Для одной частицы знаем, что

$$\psi_k(x) \sim \sin(k_n x), \qquad k_n = \frac{\pi n}{a},$$

с характерной энергией $E_0 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$.

Фермионы. Рассмотрим $s = \frac{1}{2}$, тогда суммарный спин $S = \{0,\, 1\}$. Полная волновая функция антисимметрична:

$$\Psi_{n_1 n_2} = \psi_\pm \times \chi_\mp(2S = 1 \pm 1), \tag{1}$$

где $\pm$ соответсвует симметричной и антисимметричной функции.

Энергию при $n_1 \neq n_2$ можем найти в виде

$$E_{n_1 n_2} = E_0\left(n_1^2 + n_2^2\right).$$

При $n_1 = n_2$ невозможно состояние с $S = 1$, поэтому энергия запищется в виде

$$E_{nn} = E_0 n^2.$$

Для поиска энергии основного состояния N-частиц, задача сводится к сумме квадратов

$$\sum_{n=1}^{m} n^2 = \frac{1}{6}m(m+1)(2m+1), \qquad \Rightarrow \qquad E_N = \frac{E_0}{12}(N+1)(N^2 + 2N + 3\cdot(N \bmod 2)),$$

С учетом (1), волновую функцию можем записать в виде

$$\psi_F^S(x_1,\, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2) + (-1)^S\psi_{n_1}(x_2)\psi_{n_2}(x_1)\right),$$

где $\psi(x_1,\, x_2)$ обращается в $\equiv 0$ при $n_1 = n_2$ и $S = 1$.

Бозоны. Энергия представима в виде

$$E_{n_1 n_2} = E_0(n_1^2 + n^2).$$

Энергия основного состояния для N бозонов не зависит от спина и равна

$$E_N = E_0\ N.$$

Для частиц с нулевым спином полная волновая функция может быть только симметричной, значит представима в виде ψ_F^0. Для частиц с единчиным спином Ψ симметрична, поэтому

$$\Psi_{n_1 n_2} = \psi_\pm \times \chi_\pm(S).$$

а значит $S = 1$ соотвествует ψ_+ и $S = \{0,\, 2\}$ соответсвует ψ_-.

T26

Кремний. По правилам Хунда конфигурация незаполненой части $2p^2$ будет вида: $\boxed{}\ \boxed{\uparrow}\ \boxed{\uparrow}$, а значит можем найти $J = |L - S| = 0$.

$$\mathrm{Si:}\ 1s^2\,2s^2\,2p^6\,3s^2\,3p^2, \qquad \text{основное состояние}:\ {}^3\mathrm{P}_0.$$

Сера. Незполненной явлеется оболочка $2p^4$, для которой (S: $1s^2\,2s^2\,2p^6\,3s^2\,3p^4$) находим основное состояние ${}^3\mathrm{P}_0$ в силу конфигурации $\boxed{\uparrow}\ \boxed{\uparrow}\ \boxed{\uparrow\downarrow}$.

Все термы. Найдём все термы для p^2, $l = 1$, тогда $L = \{0,\, 1,\, 2\}$ и $S = \{0,\, 1\}$. Для $S = 1$ и $L = 1$ возможны конфигурации ${}^3\mathrm{P}_{0,1,2}$. Для $S = 0$ и $L = \{0, 2\}$ получим ${}^1\mathrm{S}_0$, ${}^1\mathrm{D}_2$, аналогичные рассуждения будут верны для p^4.

Фосфор. Для фосфора p^3 основным состоянием будет ${}^4\mathrm{S}_{3/2}$. Состоянию с $M_s = \frac{1}{2}$ соответсвует конфигурация $\boxed{}\ \boxed{\uparrow}\ \boxed{\uparrow\downarrow}$, и ${}^2\mathrm{D}_{3/2,5/2}$. Для $M_L = 1$ возможны конфигурации $\boxed{}\ \boxed{\uparrow\downarrow}\ \boxed{\uparrow}$ и $\boxed{\uparrow}\ \boxed{}\ \boxed{\uparrow\downarrow}$ с обозначениями

$^2\mathrm{P}_{1/2,\,3/2}$. Наконец, для $M_L = 0$ возможны конфигурации $\boxed{\upharpoonleft}\ \boxed{\upharpoonleft}\ \boxed{\downharpoonright}$, $\boxed{\upharpoonleft}\ \boxed{\downharpoonright}\ \boxed{\upharpoonleft}$, $\boxed{\downharpoonright}\ \boxed{\upharpoonleft}\ \boxed{\upharpoonleft}$, не приводящие к новым независимым состояниям.

Ванадий. V: $\ldots 3\mathrm{d}^3$ и конфигурация $\boxed{}\,\boxed{}\,\boxed{\upharpoonleft}\ \boxed{\upharpoonleft}\ \boxed{\upharpoonleft}$ с обозначением $^4\mathrm{F}_{3/2}$.

Кобальт. Co: $\ldots 3\mathrm{d}^7$ и конфигурация $^4\mathrm{F}_{9/2}$.

Церий. Ce: $\ldots 6\mathrm{s}^2\, 5\mathrm{d}^4$ в конфигурации $^3\mathrm{H}_4$ с $S_{\max} = 1$ и $L_{\max} = 5$, хотя на самом деле $^1\mathrm{G}_4$ и конфигурация $4\mathrm{f}^1\, 5\mathrm{d}^1\, 6\mathrm{s}^2$, явлется исключением из правил Хунда.

T29

Рассмотрим в борновском приближении два короткодейтсвующих потенциала. Амплитуда рассения может быть найдена в виде

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int V(r) e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}}\, d^3\boldsymbol{r} = -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^\infty V(r)\sin(qr) r\, dr, \qquad \boldsymbol{q} \overset{\text{def}}{=} \boldsymbol{k}' - \boldsymbol{k}, \qquad q = 2k\sin(\theta/2).$$

Полное сечение рассения находим интегрируя амплитуду рассеяния:

$$\sigma = \int |f(\theta)|^2\, d\Omega = 2\pi \int_0^\pi |f(\theta)|^2 \sin\theta\, d\theta.$$

Условие применимости запишется в виде

$$\frac{m}{2\pi\hbar^2}\left| \int \frac{e^{ikr}}{r} V(r) e^{ikz}\, d^3 r \right| \ll 1.$$

Потенциал Юкавы. Подставляя $V(r) = \frac{\alpha}{r}e^{-\kappa r}$, находим

$$f = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2(\kappa^2 + q^2)}, \quad \Rightarrow \quad \sigma = \left(\frac{m\alpha}{\hbar^2\kappa}\right)^2 \frac{4\pi}{4k^2 + \kappa^2}, \qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}.$$

Условие применимости для любых энергий: $\alpha m/\kappa$
$ll\hbar^2$. Для быстрых частиц можем ослабить условие до $\alpha \ll \hbar \times \hbar k/m$.

Прямоугольная яма. Аналогично вычисляем

$$f = \frac{2mV_0 a}{\hbar^2 q^2}\left(\cos qa - \frac{\sin qa}{qa}\right), \quad \Rightarrow \quad \sigma = \frac{2\pi}{k^2}\left(\frac{mV_0 a^2}{\hbar}\right)^2 \left(1 - \frac{1}{(2ka)^2} + \frac{\sin 4ka}{(2ka)^3} - \frac{\sin^2 2ka}{(2ka)^4}\right),$$

с условием применимости $\sqrt{2mV_0}a \ll \hbar$ и для быстрых частиц $\sqrt{2mV_0}a \ll \hbar\sqrt{ka}$.