

# ЗАДАНИЕ ПО КУРСУ «КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА II»

---

**Автор заметок:** Хоружий Кирилл

**От:** 10 июня 2022 г.

## Содержание

## Первое задание

### T1

**Линейное возмущение.** Во-первых будем работать в представлении операторов  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^\dagger$ :

$$\hat{x} = \frac{x_0}{\sqrt{2}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad \hat{p} = \frac{p_0}{\sqrt{2}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger), \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad p_0 = \frac{\hbar}{x_0}.$$

Рассмотрим возмущение, вида

$$\hat{V} = \alpha x,$$

Заметим, что в первом порядке

$$V_{nn} = \frac{\alpha x_0}{\sqrt{2}} \langle n | \hat{a} + \hat{a}^\dagger | n \rangle = 0.$$

Тогда для второго порядка рассмотрим

$$V_{kn} = \frac{\alpha x_0}{\sqrt{2}} (\langle k | \sqrt{n} | n-1 \rangle + \sqrt{n+1} | n+1 \rangle) = \frac{\alpha x_0}{\sqrt{2}} (\sqrt{n} \delta_{k,n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{k,n+1}).$$

Теперь находим  $\Delta_2$ :

$$\Delta_2 = \frac{\alpha x_0^2}{2} \left( \frac{n}{\hbar\omega} - \frac{n+1}{\hbar\omega} \right) = -\frac{\alpha^2}{2m\omega^2}.$$

Действительно, при замене переменных в  $\hat{H}_0$  можем увидеть, что вторая поправка даёт точный ответ:

$$\hat{H} = \frac{m\omega^2}{2} \left( \hat{x} + \frac{\alpha}{m\omega^2} \right)^2 - \frac{\alpha^2}{2m\omega^2} + \frac{\hat{p}^2}{2m}.$$

**Нелинейное возмущение.** Рассмотрим возмущение вида

$$\hat{V} = Ax^3 + Bx^4.$$

Тогда первая поправка к энергии:

$$\Delta_1^B = V_{nn} = \frac{3B\hbar^2}{4m^2\omega^2} (2n^2 + 2n + 1), \quad \Delta_1^A = 0.$$

Вторую поправку найдём через

$$V_{kn}^A = A \left( \frac{x_0}{\sqrt{2}} \right)^3 \left( 3\delta_{k,n-1} n\sqrt{n} + 3\delta_{k,n+1} (n+1)\sqrt{n+1} + \delta_{k,n+3} \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)} + \delta_{k,n-3} \sqrt{n(n-1)(n-2)} \right).$$

Тогда

$$\Delta_2^A = -\frac{A^2\hbar^2}{8m^3\omega^4} (30n^2 + 30n + 1), \quad \Delta \approx \Delta_1^B + \Delta_2^A.$$

### T2

**Атом-ион.** Рассмотрим возмущение, вида

$$\hat{V} = -\mathbf{d}_{\text{ат}} \cdot \mathbf{E}_{\text{ион}}, \quad \mathbf{E}_{\text{ион}} = \frac{Q\mathbf{r}}{r^3}, \quad \mathbf{d}_{\text{ат}} = \sum_{i=1} e_i \mathbf{r}_i.$$

Живём в парадигме

$$\hat{\mathbb{P}} \psi_{\text{ат}} = \lambda_p \psi_{\text{ат}}, \quad \lambda_p = \pm 1, \quad \hat{\mathbb{P}} \hat{\mathbf{r}} = -\hat{\mathbf{r}} \hat{\mathbb{P}}, \quad \hat{\mathbb{P}}^2 = \mathbb{1}.$$

Для начала заметим, что

$$\Delta_1 = \langle \psi_{\text{ат}} | \hat{V} | \psi_{\text{ат}} \rangle = -\mathbf{E}_{\text{ион}} \cdot \langle \mathbf{d}_{\text{ат}} \rangle = 0.$$

Для второй поправки

$$\Delta_2 \sim -\frac{1}{r^4}.$$

**Атом-атом.** Возмущение теперь вида

$$\hat{V} = -\frac{1}{r^3} (3(\mathbf{d}_1 \cdot \mathbf{n})(\mathbf{d}_2 \cdot \mathbf{n}) - \mathbf{d}_1 \cdot \mathbf{d}_2), \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r}.$$

Первая поправка как обычно

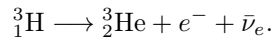
$$\Delta_1 = \langle \psi_1 | d_1^\alpha | \psi_1 \rangle \langle \psi_2 | d_2^\beta | \psi_2 \rangle \delta_{\alpha\beta} = 0.$$

Зато вторая поправка

$$\Delta_2 \sim -\frac{1}{r^6}.$$

### Т3

Рассмотрим процесс, вида



Энергия в основном состоянии

$$U_H = -\frac{e^2}{r}, \quad U_{He} = -\frac{2e^2}{r}.$$

Волновые функции:

$$\psi_{100}^H = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}, \quad \psi_{100}^{He} = \sqrt{\frac{2^3}{\pi a^3}} e^{-2r/a}.$$

При  $n = 2$ :  $l = 0, \pm 1$ , тогда

$$\psi_{200}^{He} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a} \left(1 - \frac{r}{a}\right).$$

Заметим, что остальные функции можем игнорировать, но для этого на них нужно посмотреть:

$$\begin{aligned} \psi_{2,1,-1}^{He} &= \frac{2^{5/2}}{8a\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a} e^{-i\varphi} r \sin \theta; \\ \psi_{2,1,0}^{He} &= \frac{2^{5/2}}{4a\sqrt{2\pi a^3}} e^{-r/a} r \cos \theta; \\ \psi_{2,1,1}^{He} &= \bar{\psi}_{2,1,-1}^{He}. \end{aligned}$$

Тогда искомая вероятность

$$\begin{aligned} w_{100} &= |\langle \psi_{100}^{He} | \psi_{100}^H \rangle|^2 \approx 0.7, \\ w_{200} &= |\langle \psi_{200}^{He} | \psi_{100}^H \rangle|^2 \approx 0.25, \end{aligned}$$

с их отношением  $w_{100}/w_{200} \approx 2.8$ .

### Т4

Продолжаем работать с основным состоянием водорода, а значит

$$\langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}.$$

**Электростатика.** Вспоминаем, что

$$\Delta \varphi = -4\pi \rho_0, \quad \frac{4\pi}{3} \rho_0 r^3 = -e > 0, \quad r_0 \approx 10^{-13} \text{ см.}$$

Расписываем лапласиан в сферических координатах:

$$\Delta \varphi(r) = \nabla^2 \varphi(r) = \varphi'' + \frac{2}{r} \varphi' = \frac{1}{r} (r\varphi)'', \quad \Rightarrow \quad r\varphi = -4\pi \rho_0 \iint r,$$

а значит

$$\varphi = \frac{e}{r_0^3} \frac{r^2}{2} + C_1 + \frac{C_0}{r}.$$

Считая  $\Delta \varphi$  понимаем, что  $\delta(\mathbf{r})$  быть не должно, а значит  $C_0 = 0$ . По условиям сшивки находим, что

$$U = \begin{cases} -e^2/r, & r \geq r_0 \\ e^2 r^2 / 2r_0^3 + C_1 e, & r \leq r_0 \end{cases} \Rightarrow C_1 = -\frac{3}{2} \frac{e}{r_0}.$$

Итого, искомый потенциал

$$\varphi = \frac{e}{r_0^3} \frac{r^2}{2} - \frac{3}{2} \frac{e}{r_0}.$$

**Кванты.** Поправку можем найти, считая

$$-\frac{e^2}{r} \mapsto U(r), \quad \Rightarrow \quad \varphi_{\text{new}} - \varphi = \frac{e^2 r^2}{2r_0^3} - \frac{3e}{2r_0} - \left(-\frac{e^2}{r}\right), \quad r \leq r_0.$$

А значит, интегрируя, находим

$$\Delta_1 = \langle \psi | \hat{V} | \psi \rangle = \int_0^{r_0} r^2 dr \int_{-1}^1 d \cos \theta \int_0^{2\pi} d\varphi \left( \frac{e^2 r^2}{2r_0^3} - \frac{3}{2} \frac{e}{r_0} + \frac{e^2}{r} \right) = \frac{2e^2}{5a} \left( \frac{r_0}{a} \right)^2.$$

## Т5

Помним, что

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}, \quad a = \frac{\hbar}{mc\alpha_{em}}.$$

Также помним, что

$$\mathbf{d} = e\mathbf{r}, \quad \hat{V} = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E} = -eEr \cos \theta.$$

При этом мы знаем, что

$$\Delta = -\frac{1}{2} \alpha_{ij} E^i E^j,$$

где  $\alpha_{ij}$  – тензор поляризуемости.

Замечаем, что всё также

$$\Delta_1 = \langle \psi_{100} | \hat{V} | \psi_{100} \rangle = 0.$$

Вторую поправку можем найти, как

$$\Delta_2 = \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(1)} \rangle.$$

**Поиск возмущения.** Волновую функцию  $\psi^{(1)}$  можем найти, как решение уравнения, вида

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{r} \right) \psi^{(1)} = -\frac{e^2}{2a} \frac{1}{n^2} \psi^{(1)} + \frac{\varepsilon E r \cos \theta}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}.$$

Ищем решение в виде

$$\psi^{(1)}(\mathbf{r}) = \sum_{l,m} R_l(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi).$$

Подставляя, находим

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi_{l,m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} (r R_l)'' Y_{l,m} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} R_l Y_{l,m}.$$

Так как  $Y_{10} \sim \cos \theta$ , то нам подходит только  $\psi_{10}$ , а значит

$$\psi^{(1)}(r) = \frac{eE}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a} \cos \theta \cdot f(r).$$

Подставляя это в модифицированное уравнение Шрёдингера, найдём  $f(r)$ . Так приходим к диффуру

$$\frac{f''}{2} + f' \left( \frac{1}{r} - \frac{1}{a} \right) - f \frac{1}{r^2} = -r \frac{1}{ae^2}.$$

Далее будем искать  $f$  в виде полинома второй степени:  $f(r) = Ar + Br^2$ . Тогда

$$A = \frac{a}{e^2}, \quad B = \frac{1}{2e^2}, \quad \Rightarrow \quad f(r) = \frac{ra}{e^2} + \frac{r^2}{2e^2}.$$

А значит искомая функция

$$\psi^{(1)} = \frac{eE}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a} \cos \theta \cdot \frac{r}{e^2} \left( a + \frac{r}{2} \right).$$

**Сдвиг по энергии.** Интегрируя  $\psi^{(1)}$ , находим

$$\Delta_2 = \int_0^\infty r^2 dr \int_{-1}^1 d \cos \theta \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{1}{\pi a^3} e^{-2r/a} \cos \theta \times (-eEr \cos \theta) \frac{ra}{e^2} \left( 1 + \frac{r}{2a} \right) = -\frac{9}{4} E^2 a^3.$$

Сопоставляя с поляризуемостью, находим

$$\alpha = \frac{9}{2} a^3.$$

## Т6

Теперь

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} + \hat{V},$$

где  $\hat{V} = -eE\hat{z}$ . Известно, что  $n = 2$ , тогда вырождение  $n^2 = 4$ . Можем явно выписать несколько функций

$$\begin{aligned} |200\rangle &= \frac{2}{\sqrt{4\pi}} \left(\frac{z}{2a}\right)^{3/2} e^{-r/2a} \left(1 - \frac{r}{2a}\right), \\ |210\rangle &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta \left(\frac{1}{2a}\right)^{3/2} e^{-r/2a} \frac{r}{\sqrt{3}a}, \end{aligned}$$

а для  $|211\rangle$  и  $|21-1\rangle$  важно только что есть фактор  $e^{im\varphi}$ .

Действительно,

$$\langle 21m|\hat{V}|21m'\rangle = 0, \quad m, m' = \pm 1.$$

Осталось посчитать

$$\kappa \stackrel{\text{def}}{=} \langle 200|\hat{V}|210\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \dots d^3\mathbf{r} = 3eE\frac{a}{z}.$$

Получилось матрица ненулевыми коэффициентами только в первом блоке 2 на 2:

$$\hat{V} = \begin{pmatrix} 0 & \kappa \\ \kappa & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_1 = \kappa, \quad \lambda_2 = -\kappa, \quad \lambda_3 = \lambda_4 = 0.$$

Решая секулярное уравнение, находим

$$E_2 = -\frac{\text{Ry}}{2^2}, \quad \left[\hat{H} + \hat{V} - (E_2 \pm \kappa)\mathbb{1}\right]|\psi\rangle = 0, \quad \Rightarrow \quad \mathbf{c}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, 1, 0, 0), \quad \mathbf{c}_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, -1, 0, 0).$$

Энергии расщепления

$$E^+ = E_2^{(0)} + \kappa, \quad E^- = E_2^{(0)} - \kappa.$$

## T9+T10

И снова задача на решение нестационарного уравнения Шрёдингера. Пусть в невозмущенном варианте всё  $\parallel z$ , возмущением будет  $\sigma_+$  поляризованная волна, падающая по  $Oz$ .

Гамильтониан системы:

$$\hat{H} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{H}, \quad \boldsymbol{\mu} = \frac{e\hbar}{2mc} \mathbf{sg},$$

где  $g = 2$ . Магнитное поле

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{e}_x h \cos(\omega t) + \mathbf{e}_y h \sin \omega t.$$

Тогда  $\hat{H}$  перепишется в виде

$$\hat{H} = \frac{|e|H_0}{2mc} \hbar \sigma_z + \frac{|e|h}{2mc} \hbar (\sigma_x \cos(\omega t) + \sigma_y \sin(\omega t)).$$

введем обозначения

$$\Omega_0 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{|e|H_0}{mc}, \quad \Omega' = \frac{|e|h}{mc}.$$

Вводя  $\sigma_{\pm}$  переходим к

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\Omega_0\sigma_z + \frac{1}{2}\hbar\Omega'(\sigma_+e^{-i\omega t} + \sigma_-e^{i\omega t}).$$

Далее будем решать нестационаное уравнение Шрёдингера

$$i\hbar\partial_t\chi = \hat{H}\xi, \quad \chi(t) = \exp\left(-\frac{i}{2}\tilde{\Omega}t\sigma_z\tilde{\chi}(t)\right).$$

Подставляем и находим

$$i\hbar\partial_t\chi = \exp\left(-\frac{i}{2}t\tilde{\Omega}\sigma_z\right)\left(\frac{1}{2}\hbar\tilde{\Omega}\sigma_z + i\hbar\partial_t\right)\tilde{\chi},$$

которое в свою очередь равно

$$i\hbar\partial_t\chi = \hat{H} \exp\left(-\frac{i}{2}t\tilde{\Omega}\sigma_z\right)\tilde{\chi}.$$

Домножим это всё слева на  $\exp\left(\frac{i}{2}\tilde{\Omega}t\sigma_z\right)$ , так приходим к

$$\left(\frac{1}{2}\hbar\tilde{\Omega}\sigma_z + i\hbar\partial_t\right)\tilde{\xi} = \left(\frac{1}{2}\hbar\Omega_0\sigma_z + \frac{1}{2}\hbar\Omega'(\tilde{U}^+\sigma_+\tilde{U}e^{-i\omega t} + \tilde{U}^+\sigma_-\tilde{U}e^{i\omega t})\right)\tilde{\chi}.$$

Введем обозначения

$$\sigma_{\pm} = e^{\frac{i}{2}\tilde{\Omega}t\sigma_z}\sigma_{\pm}e^{-\frac{i}{2}\tilde{\Omega}t\sigma_z}.$$

Помним коммутаторы для  $\sigma$ , получаем

$$\frac{d}{dt}\sigma_{\pm}(t) = \pm i\tilde{\Omega}\sigma_{\pm}(t),$$

где

$$\sigma_{\pm}(0) = \sigma_{\pm}, \quad \Rightarrow \quad \sigma_{\pm}(t) = \sigma_{\pm}e^{\pm i\tilde{\Omega}t}.$$

Замечаем, что наша жизнь становится лучше, если  $\tilde{\Omega} = \omega$ , а значит

$$i\hbar\partial_t\tilde{\chi} = \left(\frac{1}{2}\hbar(\Omega_0 - \omega)\sigma_z + \frac{1}{2}\hbar'(\sigma_+ + \sigma_-)\right)\tilde{\chi}.$$

Новый  $\hat{H}$  можем переписать в виде

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} \Omega_0 - \omega & \Omega' \\ \Omega' & -(\Omega_0 - \omega) \end{pmatrix} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} E_1 & V \\ V & -E_1 \end{pmatrix}.$$

Переходим к базису, диагонализующему  $\hat{H}$ . Находим его собственные числа:

$$E_{\pm} = \pm\sqrt{V^2 + E_1^2}.$$

Считая, что  $\Omega_0, \Omega' \gg \omega$  и  $\Omega^2 = \Omega_0^2 + \Omega'^2$ , можем получить

$$E_{\pm} \approx \pm\frac{\hbar}{2}\Omega \left(1 - \omega\frac{\Omega_0}{\Omega^2}\right).$$

Вспоминаем, что

$$\Omega_0 = \frac{|e|H_0}{mc}, \quad \Omega' = \frac{|e|\hbar}{mc}, \quad \Omega = \frac{|e|H}{mc}, \quad \Rightarrow \quad \frac{\Omega_0}{\Omega} = \frac{H_0}{H} = \cos\theta.$$

Тогда

$$E_{\pm} = \pm\frac{\hbar}{2}(\Omega + \omega\cos\theta).$$

Теперь вводим собственные вектора

$$|\uparrow(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_+t}|\uparrow\rangle, \quad |\downarrow(t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}E_-t}|\downarrow\rangle.$$

Собственно, сами собственные векторы

$$\begin{pmatrix} E_1 - E_{\pm} & V \\ V & -E_1 - E_{\pm} \end{pmatrix} \mathbf{v} = 0, \quad \Rightarrow \quad \mathbf{v} = \frac{2}{\hbar} \begin{pmatrix} E_1 + E_{\pm} \\ V \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} \Omega_0 - \omega \pm (\Omega - \omega\cos\theta) \\ \Omega' \end{pmatrix}.$$

Тогда матрица перехода

$$S = \begin{pmatrix} \Omega_0 - \omega + \Omega - \omega\cos\theta & \Omega_0 - \omega - \Omega + \omega\cos\theta \\ \Omega' & \Omega' \end{pmatrix}.$$

Находим к ней обратную

$$S^{-1} = \frac{1}{2\Omega'(\Omega - \omega\cos\theta)} \begin{pmatrix} \Omega' & -\Omega_0 + \omega + \Omega - \omega\cos\theta \\ -\Omega' & \Omega_0 - \omega + \Omega - \omega\cos\theta \end{pmatrix}.$$

Тогда

$$\tilde{\xi}(t) = S \begin{pmatrix} e^{\frac{i}{2}E_+t} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i}{2}E_-t} \end{pmatrix} S^{-1} |\chi(0)\rangle.$$

Перемножая, находим

$$|\tilde{\chi}(t)\rangle_1 = \cos\left(\frac{E_+t}{\hbar}\right) + i(\omega - \Omega_0)\sin\left(\frac{E_+t}{\hbar}\right), \quad |\tilde{\chi}(t)\rangle_2 = \frac{i\Omega'\sin\left(\frac{E_+t}{\hbar}\right)}{\Omega - \omega\cos\theta},$$

а искомая величина будет

$$|\chi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{2}\omega t\sigma_z} |\tilde{\chi}(t)\rangle.$$

**Поляризация.** Осталось найти

$$\mathbf{P} = \langle \xi(t) | \boldsymbol{\sigma} | \xi(t) \rangle,$$

которое считать и считать, а получится

$$\begin{aligned} P_x &= \sin \varphi (\cos \varphi (1 - \cos \Omega t) \cos \omega t - \sin \Omega t \sin \omega t), \\ P_y &= \sin \varphi (\cos \varphi (1 - \cos \Omega t) \sin \omega t + \sin \Omega t \cos \omega t), \\ P_z &= \cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi \cos \Omega t, \end{aligned}$$

где было введено обозначение

$$\sin \varphi = \frac{\Omega}{\Omega - \omega \cos \theta}, \quad \cos \varphi = \frac{\omega - \Omega_0}{\Omega - \omega \cos \theta}.$$

**Next.** Вообще

$$\begin{pmatrix} P_x \\ P_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \omega t & -\sin \omega t \\ \sin \omega t & \cos \omega t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{P}_x \\ \tilde{P}_y \end{pmatrix},$$

поэтому поляризация «следует» за  $\mathbf{H}$ .

**Фаза Берри.** Её можно посчитать, как

$$\Delta_c \gamma = \oint A_\mu da^\mu = \oint_0^{2\pi} A_\varphi d\varphi, \quad A_\varphi = \langle \psi | \partial_\mu | \psi \rangle = i \langle \uparrow | \partial_\varphi | \uparrow \rangle.$$

где  $a$  – адиабатически меняющийся параметр гамильтониана.

Знаем, что

$$|\uparrow\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |+\rangle + e^{i\varphi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |-\rangle.$$

Тогда

$$A_\varphi = -\sin^2 \frac{\theta}{2} = \frac{1}{2} (\cos \theta - 1),$$

тогда искомая фаза Берри

$$\Delta_c \gamma = \pi (\cos \theta - 1).$$

Связь с телесным углом можно найти, посчитав

$$\Omega = \int_0^1 d \cos \theta' \int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi (1 - \cos \theta),$$

действительно пропорциональны.

## T11

**Матричный элемент.** Найдём матричный элемент оператора эволюции для свободной частицы

$$Z[0] = \langle q_N | U(t'', t') | q_0 \rangle = \int \mathcal{D}q \mathcal{D}p e^{\frac{i}{\hbar} S} = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \frac{dp_N}{2\pi\hbar} \prod_{k=1}^{N-1} \frac{dq_k dp_k}{2\pi\hbar} \exp \left( \frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^N \left( p_k \dot{q}_k dt - \frac{p_k^2}{2m} dt \right) \right).$$

Перепишем аргумент экспоненты в виде

$$\sum_{k=1}^N p_k \dot{q}_k dt - \frac{p_k^2}{2m} dt = \sum_{k=1}^{N-1} q_k (p_k - p_{k+1}) + q_N p_N - q_0 p_1 - \sum_{k=1}^N \frac{p_k^2}{2m} dt$$

Вспомяная, что

$$\int_{\mathbb{R}} dt \delta(t) e^{i\omega t} = 1, \quad \Rightarrow \quad \int_{\mathbb{R}} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} = \delta(t),$$

можем проинтегрировать по всем координатам и получить

$$\int \exp \left( \frac{i}{\hbar} q_k (p_k - p_{k+1}) \right) = 2\pi\hbar \delta(p_k - p_{k+1}), \quad k = 1, \dots, N-1.$$

Теперь интегрирование по импульсу тривиально:

$$Z[0] = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \frac{dp_N}{2\pi\hbar} \exp \left( \frac{i}{\hbar} p_N (q_N - q_0) - \frac{p_N^2}{2m} \underbrace{N dt}_{t'' - t'} \right) = \sqrt{\frac{-im}{2\pi\hbar(t'' - t')}} \exp \left( \frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(q'' - q')^2}{t'' - t'} \right),$$

где мы воспользовались

$$\int_{\mathbb{R}} e^{-ax^2 + bx} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{b^2/4a}, \quad \int_{\mathbb{R}} e^{\pm ix^2} dx = e^{\pm i\pi/4} \sqrt{\pi}.$$

**Уравнение Шрёдингера.** Убедимся, что  $Z[0] = \langle q|U(t, t')|q' \rangle$  удовлетворяет уравнению Шрёдингера

$$i\hbar\partial_t Z = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_q^2 Z.$$

Введем для удобства

$$\sqrt{\frac{-im}{2\pi\hbar(t''-t')}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(q''-q')^2}{t''-t'}\right) \stackrel{\text{def}}{=} \alpha e^\beta.$$

Тогда

$$\partial_t Z = \alpha \left( -\frac{1}{2} \frac{1}{t-t'} - \frac{im}{2\hbar} \frac{(q-q')^2}{(t-t')^2} \right) e^\beta, \quad \partial_q Z = \alpha \frac{im}{\hbar} \frac{q-q'}{t-t'} e^\beta, \quad \partial_q^2 Z = \frac{i\alpha m}{\hbar(t-t')} \left( 1 + \frac{im}{\hbar} \frac{(q-q')^2}{t-t'} \right) e^\beta,$$

что и требовалось доказать.

## T12

Как обычно

$$Z[j] = \mathcal{N} \int \mathcal{D}q \exp\left(\frac{i}{\hbar} S + \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} j(t)q(t) dt\right).$$

Запишем в виде

$$q(t) = \tilde{q}(t) + G^{(1)}(t), \quad \hat{\Gamma} G^{(1)}(t) = 0, \quad G^{(1)}(t') = q', \quad G^{(1)}(t'') = q''.$$

Тогда верно, что

$$\int q \hat{\Gamma} q dt = \int \tilde{q} \hat{\Gamma} \tilde{q} dt, \quad \Rightarrow \quad Z = \mathcal{N} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} j(t) G^{(1)}(t) dt} \int \mathcal{D}\tilde{q} \exp\left(\frac{i}{2\hbar} \int \tilde{q} \hat{\Gamma} \tilde{q} dt + \frac{i}{\hbar} \int j \tilde{q} dt\right).$$

Можем записать, что

$$\tilde{q}(t) = \bar{q}(t) - \hat{\Gamma}^{-1} j(t), \quad \hat{\Gamma}^{-1} j(t_1) = - \int G^{(2)}(t_1 - t_2) j(t_2) dt_2.$$

Подставляя  $\bar{q}$ , находим

$$\frac{1}{2} \int \tilde{q} \hat{\Gamma} \tilde{q} dt + \int j \tilde{q} dt = \frac{1}{2} \int \left( \bar{q} \hat{\Gamma} \bar{q} + \hat{\Gamma}^{-1} j \hat{\Gamma} \hat{\Gamma}^{-1} j - 2j \hat{\Gamma}^{-1} j \right),$$

а значит

$$Z = \mathcal{N} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} j G^{(1)} dt + \frac{1}{\hbar} \int G^{(2)}(t_1 - t_2) j(t_1) j(t_2) dt_1 dt_2\right) \int \mathcal{D}\bar{q} e^{\frac{i}{2\hbar} \int \bar{q} \hat{\Gamma} \bar{q} dt},$$

где  $\int \bar{q} \hat{\Gamma} \bar{q} dt = e^{\frac{i}{\hbar} G_0}$ , а значит

$$Z = \mathcal{N} e^{\frac{i}{\hbar} G[j]}, \quad G[j] = G_0 + \int G^{(1)} j(t) dt + \frac{1}{2!} \int G^{(2)}(t_1 - t_2) j(t_1) j(t_2) dt_1 dt_2.$$

## Второе задание

### Уравнение Паули для позитрона

Известно, что для электрона можем записать уравнение Паули:

$$\psi(t, \mathbf{r}) = e^{\frac{i}{\hbar} mc^2 t} \begin{pmatrix} \varphi(t, \mathbf{r}) \\ x(t, \mathbf{r}) \end{pmatrix}.$$

Для позитрона можем воспользоваться анзацем

$$\psi(t, \mathbf{r}) = e^{-\frac{i}{\hbar} mc^2 t} \begin{pmatrix} \varphi(t, \mathbf{r}) \\ x(t, \mathbf{r}) \end{pmatrix}.$$

Подставляем это в уравнение Дирака

$$\tilde{\mathcal{P}} = \mathcal{P}_\mu \gamma^\mu, \quad (\tilde{\mathcal{P}} - mc)\psi(t, \mathbf{r}), \quad \gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & -\boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}.$$

Где помним про  $\mathcal{P}_\mu = i\hbar\partial_\mu - \frac{e}{c} A_\mu$ . Помним про  $\partial_{x_0} = \frac{1}{c}\partial_t$ .

Введем оператор  $\hat{\varepsilon} = i\hbar\partial_t$ ,  $A_0 = \Phi$  и запишем получившуюся систему вида

$$(\hat{\varepsilon} - e\Phi - 2mc^2)\varphi - c(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P})\chi = 0, \\ (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P})\varphi + (e\Phi - \hat{\varepsilon})\chi = 0.$$



Решая, находим

$$\varphi = -\frac{1}{1 - \frac{\hat{\varepsilon} - e\Phi}{2mc^2}} \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P})}{2mc} \chi = -(1 + \hat{W}) \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P})}{2mc} \chi.$$

Теперь, кстати  $\varphi$  – малая компонента,  $\chi$  – большая, при рассмотрении  $\frac{v}{c} \ll 1$ .

Вводя  $\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma^0$ , получаем

$$c\bar{\psi}(\tilde{\mathcal{P}} - mc)\psi = \chi^\dagger \left( \hat{\varepsilon} - e\Phi + \frac{1}{2m}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P})(1 + \hat{W})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P}) \right).$$

Считая  $\frac{v}{c} \ll 1$ , верно, что

$$1 + \hat{W} \approx 1 + \frac{\hat{\varepsilon} - e\Phi}{2mc^2}.$$

Умея сворачивать  $\boldsymbol{\sigma}$ , находим

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P})^2 = \mathbf{P}^2 + i\boldsymbol{\sigma} \cdot [\mathbf{P} \times \mathbf{P}].$$

Распишем покомпонентно

$$[\mathbf{P} \times \mathbf{P}]_\alpha = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} (-i\hbar\partial_\beta - \frac{e}{c}A_\beta) (-i\hbar\partial_\gamma - \frac{e}{c}A_\gamma) = i\hbar\frac{e}{c}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}(\partial_\beta A_\gamma),$$

откуда находим

$$[\mathbf{P} \times \mathbf{P}]_\alpha = i\hbar\frac{e}{c}\mathcal{H}_\alpha, \quad (\text{rot } \mathbf{A})_\alpha = \mathcal{H}_\alpha.$$

Таким образом можем записать действие:

$$S_{NR} = \int d^4x \chi^\dagger \left( \hat{\varepsilon} - e\Phi + \frac{\mathbf{P}^2}{2m} - \frac{e\hbar}{2mc}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{H}) \right) \chi.$$

Варьируя действие, находим

$$i\hbar\partial_t\chi = \left( e\Phi - \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + \frac{e\hbar}{2mc}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{H}) \right) \chi,$$

которое по идее есть Шрёдингер, вида  $i\hbar\partial_t\chi = \hat{H}\chi$ .

Нужно вспомнить, что у нас должна быть правильная спинорная метрика (переходим к другой киральности):

$$\chi_{NR} = i\sigma_2\chi^*.$$

Так что подставляя это наверх, находим

$$-i\hbar\partial_t\chi^* = (\dots)\chi^*.$$

Воспользуемся свойством  $\sigma_2\boldsymbol{\sigma}^*\sigma_2 = -\boldsymbol{\sigma}$ . Домножая последнее уравнение на  $i\sigma_2$ , находим

$$i\hbar\partial_t\xi_{NR} = \left( \frac{\mathbf{P}^2}{2m} - e\Phi + \frac{e\hbar}{2mc}g(\mathbf{s} \cdot \mathbf{H}) \right) \chi_{NR}, \quad g = 2, \quad \mathbf{s} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}.$$

## Правила Хунда

**Определитель Слетера.** Рассмотрим  $N$  электронов со спином  $s = \frac{1}{2}$ , и квантовыми числами  $\{k_1, \dots, k_N\}$  (обычно  $\{n, l, m\}$ ). Далее описываем систему в виде  $x = \{\mathbf{r}, m_s\}$ .

Рассмотрим случай отсутствия спин-орбитального взаимодействия, то есть спин коммутирует с гамильтонианом, тогда будет иметь место факторизация  $|k\rangle \otimes |m_s\rangle$ .

Вспоминаем связь спина со статистикой, тогда

$$\Phi_{k_1, \dots, k_N}(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{pmatrix} \psi_{k_1}(x_1) & \dots & \psi_{k_1}(x_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{k_N}(x_1) & \dots & \psi_{k_N}(x_N) \end{pmatrix}.$$

**Правила Хунда: феноменология.** Располагаем нерелятивистские термы  $^{2s+1}L$  по I правилу Хунда. В первых считаем, что  $E \rightarrow \min$  при  $s \rightarrow \max$ . Далее меняем  $E \rightarrow \min$  при  $L \rightarrow \max$ .

**Правила Хунда: релятивистские поправки I.** Спин-орбитальное взаимодействие вносит в незаполненные оболочки  $(2^{2(2l+1)})$

$$V_{sl} = \sum_f \frac{e\hbar^2}{2m^2c^2} \frac{V'(r_f)}{r_f} (\mathbf{s}_f \cdot \mathbf{l}_f).$$

Рассмотрим  $n_f \leq 2l + 1$ , тогда будем считать  $\mathbf{s}_f \approx \frac{1}{n_f} \mathbf{S}$ ,  $r_f \approx \langle r \rangle$ , тогда

$$\langle V_{sl} \rangle_{LS} \approx \sum_{f=1}^{n_f} \frac{e\hbar^2}{2m^2c^2} \frac{\langle V' \rangle}{\langle r \rangle} \frac{1}{n_f} (\mathbf{S} \cdot \mathbf{l}_f) = \underbrace{\frac{e\hbar^2}{2m^2c^2} \frac{\langle V' \rangle}{\langle r \rangle} \frac{1}{n_f}}_{A_{LS} \sim \alpha^4 mc^2 > 0} (\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}).$$

Считая скалярное произведение, находим

$$\langle V_{sl} \rangle_{LS} = \frac{1}{2} A_{LS} (J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)).$$

Так получаем правило интервалов Ланде

$$\Delta \langle V_{sl} \rangle_{LS} \approx A_{LS} J.$$

**Правила Хунда: релятивистские поправки II.** Теперь рассмотрим  $n_f > 2l + 1$ , но заполненные оболочки теперь существуют вместе с дырками:

$$n_h = 2(2l + 1) - n_f < 2l + 1.$$

Понятно, что

$$\sum_{f=1}^{n_f} \mathbf{s}_f + \sum_{n=1}^{n_h} \mathbf{s}_h = 0.$$

Можем рассматривать

$$\mathbf{S} = \sum_{f=1}^{n_f} \mathbf{s}_f + \sum_{f=1}^{n_h} \tilde{\mathbf{s}} + \sum_{h=1}^{n_h} \mathbf{s}_h = \mathbf{S}_h.$$

Теперь рассматриваем орбитальный момент

$$\mathbf{L} = \sum_{f=1}^{n_f} \mathbf{l}_f, \quad \mathbf{L} = \sum_{f=1}^{n_h} \tilde{\mathbf{l}}_f = \sum_{h=1}^{n_h} \mathbf{l}_h = \mathbf{L}_h,$$

где теперь выполняется

$$\tilde{\mathbf{L}} + \mathbf{L}_h = 0, \quad \Rightarrow \quad \langle V_{sl} \rangle_{LS} \approx \frac{1}{2} A_{SL}^h (\mathbf{S}_h \cdot \mathbf{L}_h) = -\frac{1}{2} A_{SL} (\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}).$$

Таким образом при фиксированных  $S, L$  энергия  $E \rightarrow \min$ :  $n_f \leq 2l + 1$  при  $J = |L - S|$ ;  $n_f > 2l + 1$  при  $J = L + S$ .

## T15

По определению

$$W^\mu = -\frac{1}{2} \varepsilon^{\mu\nu\lambda\rho} p_\nu S_{\lambda\rho}, \quad S_{ik} = \hbar \varepsilon_{ikl} s^l.$$

Тогда подставляя  $\mu = 0$ , находим

$$W^0 = -\frac{1}{2} \varepsilon^{0ijk} p_i \hbar \varepsilon_{jkn} s^n = -\hbar p_i s^i = \hbar (\mathbf{p} \cdot \mathbf{s}).$$

Теперь, с учетом  $S_{0i} = i \operatorname{sign}(\mathbf{s}) s^i \hbar$ , находим

$$\begin{aligned} W^i &= -\frac{1}{2} \varepsilon^{i0jk} p_0 S_{jk} - \varepsilon^{ij0k} p_j S_{0k} = \frac{1}{2} \varepsilon^{0ijk} p_0 \hbar \varepsilon_{jkn} s^n - i \operatorname{sign}(\mathbf{s}) \varepsilon^{0ijk} p_j s_k \hbar = \\ &= \hbar \left( p_0 s^i - i \operatorname{sign}(\mathbf{s}) [\mathbf{p} \times \mathbf{s}]^i \right). \end{aligned}$$

## T22

**Уровни Ландау.** Для частицы в постоянном магнитном поле гамильтониан запишется в виде

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{\mu}{s} \hat{s}_z \mathcal{H} + eA_0, \quad \hat{\mathcal{P}}^\alpha = -i\hbar \partial_\alpha - \frac{e}{c} A_\alpha.$$

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  $\chi$

$$\chi'' + \frac{2m}{\hbar^2} \left( \underbrace{\left( E + \frac{\mu\sigma}{s}\mathcal{H} - \frac{1}{2m}p_z^2 \right)}_{E_{\text{osc}} = \hbar\omega_{\mathcal{H}}(n+1/2)} - \frac{m}{2}\omega_{\mathcal{H}}^2(y-y_0)^2 \right) \chi = 0,$$

где введены

$$y_0 \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{cp_x}{e\mathcal{H}}, \quad \omega_{\mathcal{H}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{|e|\mathcal{H}}{mc}.$$

Таким образом для уровней энергии частицы находим

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_{\mathcal{H}} + \frac{p_z^2}{2m} - \frac{\mu\sigma}{s}\mathcal{H},$$

что и называют уровнями Ландау. Подставляя  $\mu/s = -|e|\hbar/mc$ , можем написать уровни в виде

$$E = \left(n + \frac{1}{2} + \sigma\right) \hbar\omega_{\mathcal{H}} + \frac{p_z^2}{2m}.$$

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  $\Delta p_x$  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  $\Delta p_x = e\hbar l_y/c$ , 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  $\Delta p_z$ :

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

## 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

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

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:

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

где  $\pm$  соответствует симметричной и антисимметричной функции.

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

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

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

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

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

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

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

**Бозоны.** Энергия представима в виде

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

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  $\psi_F^0$ . Для частиц с единичным спином  $\Psi$  симметрична, поэтому

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

а значит  $S = 1$  соответствует  $\psi_+$  и  $S = \{0, 2\}$  соответствует  $\psi_-$ .

## T26

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

$$\text{Si: } 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2, \quad \text{основное состояние: } {}^3P_0.$$

**Сера.** Незаполненной является оболочка  $2p^4$ , для которой (S:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$ ) находим основное состояние  ${}^3P_0$  в силу конфигурации  $\uparrow \uparrow \uparrow$ .

**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  ${}^3P_{0,1,2}$ . Для  $S = 0$  и  $L = \{0, 2\}$  получим  ${}^1S_0, {}^1D_2$ , аналогичные рассуждения будут верны для  $p^4$ .

**Фосфор.** Для фосфора  $p^3$  основным состоянием будет  ${}^4S_{3/2}$ . Состоянию с  $M_s = \frac{1}{2}$  соответствует конфигурация  $\square \uparrow \uparrow$ , и  ${}^2D_{3/2,5/2}$ . Для  $M_L = 1$  возможны конфигурации  $\square \uparrow \uparrow$  и  $\uparrow \square \uparrow$  с обозначениями  ${}^2P_{1/2,3/2}$ . Наконец, для  $M_L = 0$  возможны конфигурации  $\uparrow \uparrow \downarrow$ ,  $\uparrow \downarrow \uparrow$ ,  $\downarrow \uparrow \uparrow$ , не приводящие к новым независимым состояниям.

**Ванадий.** V:  $\dots 3d^3$  и конфигурация  $\square \square \uparrow \uparrow \uparrow$  с обозначением  ${}^4F_{3/2}$ .

**Кобальт.** Co:  $\dots 3d^7$  и конфигурация  ${}^4F_{9/2}$ .

**Церий.** Ce:  $\dots 6s^2 5d^4$  в конфигурации  ${}^3H_4$  с  $S_{\max} = 1$  и  $L_{\max} = 5$ , хотя на самом деле  ${}^1G_4$  и конфигурация  $4f^1 5d^1 6s^2$ , является исключением из правил Хунда.

## T29

Рассмотрим в борновском приближении два короткодействующих потенциала. Амплитуда рассеяния может быть найдена в виде

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

Полное сечение рассеяния 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

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

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

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

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

$$f = \frac{2mV_0a}{\hbar^2 q^2} \left( \cos qa - \frac{\sin qa}{qa} \right), \quad \Rightarrow \quad \sigma = \frac{2\pi}{k^2} \left( \frac{mV_0a^2}{\hbar} \right)^2 \left( 1 - \frac{1}{(2ka)^2} + \frac{\sin 4ka}{(2ka)^3} - \frac{\sin^2 2ka}{(2ka)^4} \right),$$

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

## Т30

Для потенциала, вида

$$V(r) = \frac{\beta}{r^2}, \quad \beta > 0,$$

найдем фазы рассеяния  $\delta_l$ .

Запишем уравнение Шредингера для парциальной волны  $u_l(r) = rR_l(r)$ :

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{1}{r^2} \left( l(l+1) + \frac{2m\beta}{\hbar^2} \right) \right) u_l(r) = 0.$$

Рассмотрим замену  $u_l(r) = \sqrt{r}\varphi(r)$

$$\varphi'' + \frac{1}{r}\varphi' + \left( k^2 - \frac{1}{r^2} \left( \left( l + \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{2m\beta}{\hbar^2} \right) \right) \varphi = 0,$$

решения которого знаем в виде функций Бесселя  $J_{\pm\nu}(kr)$ , где

$$\nu = \sqrt{\left( l + \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{2m\beta}{\hbar^2}}.$$

Требуя  $u_l(0) = 0$ , находим решение в виде

$$u_l(r) = c \sqrt{\frac{\pi kr}{2}} J_{\nu}(kr).$$

Полезно посмотреть асимптотику на бесконечности, для которой

$$u_l(r) \sim c \sin \left( kr - \frac{\pi\nu}{2} + \frac{\pi}{4} \right) = c \sin \left( kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l \right),$$

откуда находим искомые фазы рассеяния

$$\delta_l = -\frac{\pi}{2} \left( \sqrt{\left( l + \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{2m\beta}{\hbar^2}} - \left( l + \frac{1}{2} \right) \right).$$

**Предельный случай.** В пределе  $2m\beta/\hbar^2 \ll 1$  получаем

$$\delta_l \approx -\frac{\pi}{2} \frac{m\beta}{\hbar^2(l + \frac{1}{2})},$$

откуда также получаем  $|\delta_l| \ll 1$ .

В таком случае можем просуммировать ряд

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos \theta) \approx \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \delta_l P_l(\cos \theta) \approx -\frac{\pi m\beta}{\hbar^2 k} \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos \theta).$$

Суммируя полиному Лежанда, находим

$$f(\theta) \approx -\frac{\pi m\beta}{2k\hbar^2 \sin(\theta/2)},$$

аналогично тому, что получили бы в борновском приближении.

## Т31

Найдем сечение рассеяния для  $ka \ll 1$ , а значит доминирует  $s$ -рассеяние и  $p$ -рассеяние. Для потенциала

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & r \leq a, \\ 0, & r > a. \end{cases}$$

Теперь

$$R_{k0} = \frac{1}{r} u(r), \quad u(0) = 0, \quad -\frac{\hbar^2}{2m} u'' + V u = E u.$$

Для  $r > a$   $u'' + k^2 u = 0$ , тогда

$$u_{\text{II}} = A \sin(kr + \delta_0).$$

Для  $r \leq a$

$$u'' + (k^2 + \kappa^2) u = 0, \quad \tilde{k}^2 \stackrel{\text{def}}{=} k^2 + \kappa^2, \quad U_0 = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}, \quad \Rightarrow \quad U_{\text{I}} = B \sin(\tilde{k}r).$$

Сшиваем на границах:

$$\frac{U'_I}{U_I} = \frac{U'_{II}}{U_{II}}, \quad \Rightarrow \quad \operatorname{tg}(ka + \delta_0) = \frac{k}{\tilde{k}} \operatorname{tg}(\tilde{k}a), \quad \Rightarrow \quad \delta_0 = -ka + \operatorname{arctg}\left(\frac{k}{\tilde{k}} \operatorname{tg}(\tilde{k}a)\right).$$

Рассмотрим случай  $\frac{k}{\tilde{k}} \operatorname{tg}(\tilde{k}a) \ll ka \ll 1$ , а тогда  $\delta_0 \approx -ka$ , а значит  $f_0 = \frac{1}{k} e^{i\delta_0} \sin \delta_0 \approx -a$ .

Другой случай  $\operatorname{tg}(\tilde{k}a) \rightarrow \infty$ . Тогда  $\delta_0 \approx \operatorname{arctg}(\infty) = \frac{\pi}{2}$ , что ещё называют резонансным рассеянием, так как  $\sin \delta_0 = 1$ .

Наконец, посмотрим на  $\frac{\operatorname{tg}(\tilde{k}a)}{ka} \approx 1$ , тогда  $\delta_0 \approx 0$ , и получается  $\tilde{k}a \ll 1$  и  $f_0 \rightarrow 0$  – эффект Рамзаура.

При барьере  $\tilde{k} \rightarrow i\tilde{k}$ , получим уравнения

$$\delta_0 = -ka + \operatorname{arctg}\left(\frac{ka}{\tilde{k}a} \operatorname{th}(\tilde{k}a)\right).$$

## Т32

**II.** Для случая быстрых частиц  $ka \gg 1$  рассмотрим «черную дыру», тогда для  $l < ka$  получаем<sup>1</sup>  $S_l = 0$  и для  $l > ka$  будет  $S_l = 1$ .

Записываем оптическую теорему

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k} \sum_l \operatorname{Im} f_l.$$

Сохраняются  $f_l$  сохраняются

$$f_l = \frac{2l+1}{2ik}(S_l - 1).$$

Также помним, что нужно суммировать до  $l = ka$ , при больших  $l$  сечение обращается в 0. Итого получаем

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k} \sum_{l=0}^{ka} (2l+1) \frac{1}{2k} = \frac{2\pi}{k^2} (ka+1)^2 = 2\pi a^2.$$

**I.** Рассмотрим непроницаемую сферу

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r \leq a, \\ \infty, & r > a. \end{cases}$$

Вспоминаем

$$R_{kl} \approx \frac{c_l}{r} \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right).$$

Верно, что  $R_{kl}|_{r=a} = 0$ :

$$ka - \frac{\pi l}{2} + \delta_l = \pi n \rightarrow 0, \quad \Rightarrow \quad \delta_l = \frac{\pi l}{2} - ka.$$

Находим сечение рассеяния:

$$f_l = \frac{2l+1}{k} e^{i\delta_l} \sin \delta_l.$$

Пользуемся оптической теоремой, находим

$$\operatorname{Im} f_l = \frac{2l+1}{2k} - \frac{2l+1}{2k} \cos(\pi l - 2ka).$$

Вклад от первого слагаемого дает половину  $\sigma_{\text{geom}} = 4\pi a^2$ . Для расчёта второго слагаемого рассмотрим четные/нечетные значения  $l$ :

$$\sigma_{\text{чет}} = \frac{4\pi}{k} \sum_{m=0}^{ka/2} (2l+1) \frac{\cos(2ka)}{2k} = \frac{2\pi}{k^2} \cos(2ka) (ka+1) \frac{ka+1}{2}, \quad l = 2m.$$

Теперь нечётный вклад  $l = 2m+1$ :

$$\sigma_{\text{нечет}} = \frac{2\pi}{k} \sum_{m=0}^{ka/2-1} (4m+3) \frac{\cos(2ka)}{2k} = \frac{2\pi}{k^2} \cos(2ka) (ka-1) \frac{ka}{2}.$$

Таким образом находим

$$\sigma_{\text{чет}} - \sigma_{\text{неч}} = \frac{\pi}{k^2} \cos(2ka) \left(\frac{5}{2}ka + 2\right).$$

<sup>1</sup> Вообще верно, что  $\hbar k \cdot b = \hbar l$ , где  $b$  – прицельный параметр.

Однако в финальное выражение входит только первое слагаемое

$$\sigma_{\text{tot}}|_{ka \gg 1} = 2\pi a^2.$$

### Т33

Для двух тождественных частиц можем написать  $\Psi$  в виде

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, s_1, s_2) = \Phi(\mathbf{R})\psi(\mathbf{r})\chi(s_1, s_2),$$

для приведенной массы  $\mu = m/2$ ,  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ ,  $\mathbf{R}$  – координаты центра масс.

**$\alpha$ -частицы.** Спин  $\alpha$ -частицы равен нулю, так что говорим про  $\Psi$  для бозонов, симметричную по перестановкам. Тогда асимптотика на бесконечности имеет вид

$$\psi(\mathbf{r})|_{r \rightarrow \infty} \sim e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} + (f(\theta) + f(\pi - \theta)) \frac{e^{ikrsv}}{r}.$$

Тогда сечение рассеяния может быть записано в виде

$$d\sigma = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 d\Omega.$$

**Протоны.** Рассмотрим теперь случай фермионов с антисимметричной по перестановке  $\Psi$ . Для состояния с  $s_1 + s_2 = S = 0$   $\chi$  антисимметрично, а значит  $\psi$  симметрична, то есть совпадает с рассмотренным случаем для  $\alpha$ -частиц.

Для  $S = 1$  спиновая функция  $\chi$  симметрично, тогда  $\psi$  антисимметрична:

$$d\sigma_{S=1} = |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 d\Omega.$$

Считая состояния равновероятными  $|\uparrow\rangle$  и  $|\downarrow\rangle$ , находим, что

$$\langle d\sigma \rangle_S = \frac{1}{4}|f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 + \frac{3}{4}|f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2.$$

### Т34

Найдём сечение фотоэффекта для атома водорода. Рассмотрим реакцию

$$\gamma + H \longrightarrow p + e^-,$$

где считаем электрон свободной нерелятивистской частицей. По условию энергия  $\gamma$ -кванта  $\hbar\omega \gg \text{Ry}$ . Рассматриваем основное состояние атома водорода

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}.$$

По определению

$$d\sigma = \frac{dw_{fi}}{j_{\text{in}}}.$$

С учётом нормировки

$$\langle \lambda', \mathbf{k}' | \lambda, \mathbf{k} \rangle = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{\lambda\lambda'}, 2\hbar\omega, \quad \Rightarrow \quad j_{\text{in}} = 2\hbar\omega c.$$

Из правила Ферми:

$$dw_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(\sum E) |V_{fi}|^2 d\nu_{\text{f}}, \quad d\nu_{\text{f}} = \frac{d^3 p_{\text{f}}}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{d^3 k_{\text{f}}}{(2\pi)^3}.$$

Рассматриваем переход из  $|i\rangle = |\psi_{100}\rangle |\mathbf{k}_{\text{in}}, \lambda_{\text{in}}\rangle$  в  $|f\rangle = |p_{\text{f}}\rangle |0\rangle$  (фотон поглотился), где  $\lambda_{\text{in}} = \{1, 2\}$  – возможные поляризации, по которым впоследствии усредним.

**Квантованное поле.** Будем решать задачу в дипольном приближении:

$$\hat{V} = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}, \quad \mathbf{d} = -e\mathbf{r}.$$

Так как энергия поглощается из ЭМ поля, то рассматриваем

$$\hat{\mathcal{A}}(t, \mathbf{r}) = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2k_0} \sum_{\lambda=1,2} \left( \hat{a}_{\lambda, \mathbf{k}} \boldsymbol{\epsilon}_{\lambda} e^{-i\omega t + i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \hat{a}_{\lambda, \mathbf{k}}^{\dagger} \boldsymbol{\epsilon}_{\lambda}^* e^{i\omega t - i\mathbf{k}\mathbf{r}} \right).$$

Для свободных полей

$$\hat{\mathbf{E}}(t, \mathbf{r}) = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \hat{\mathcal{A}} = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{i}{2} (\hat{a} \boldsymbol{\epsilon} e^{i\omega t + i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \hat{a}^{\dagger} \boldsymbol{\epsilon}^* e^{i\omega t - i\mathbf{k}\mathbf{r}}).$$

**Матричный элемент.** Таким образом можем найти матричный элемент

$$V_{fi} = \langle f | -\hat{\mathbf{d}} \cdot \hat{\mathbf{E}} | i \rangle = \int d^3 r e^{-i\mathbf{k}_{\text{f}}\mathbf{r}} (-e\mathbf{r}) \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a} \cdot \langle 0 | \hat{\mathbf{E}} | \mathbf{k}_{\text{in}}, \lambda_{\text{in}} \rangle.$$

Так как для фотона итоговое состояние вакуум, то вклад будет только от  $\hat{a}$ :

$$\langle 0 | \hat{\mathbf{E}} | \mathbf{k}_{\text{in}}, \lambda_{\text{in}} \rangle = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{i}{2} (\epsilon_{\lambda} e^{-i\omega t + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \langle 0 | \hat{a} | \mathbf{k}_{\text{in}}, \lambda_{\text{in}} \rangle + 0),$$

где подставляя условие нормировки

$$\langle 0 | \hat{a} | \mathbf{k}_{\text{in}}, \lambda_{\text{in}} \rangle = \langle \mathbf{k}, \lambda | \mathbf{k}_{\text{in}}, \lambda_{\text{in}} \rangle = (2\pi)^3 \delta_{\lambda\lambda_{\text{in}}} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_{\text{in}}) 2\hbar\omega,$$

находим выражение для матричного элемента поля

$$\langle 0 | \hat{\mathbf{E}} | \mathbf{k}_{\text{in}}, \lambda_{\text{in}} \rangle = i\hbar\omega_{\text{in}} \epsilon_{\lambda_{\text{in}}} e^{-i\omega_{\text{in}} t + i\mathbf{k}_{\text{in}} \cdot \mathbf{r}}.$$

Подставляя это в матричный элемент  $V_{fi}$ , наконец приходим к выражению, вида

$$V_{fi} = -i\hbar\omega_{\text{in}} e \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} \int d^3 r e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - r/a} (\epsilon_{\lambda_{\text{in}}} \cdot \mathbf{r}) = -\frac{ie\hbar\omega_{\text{in}}}{\sqrt{\pi a^3}} (\epsilon_{\lambda_{\text{in}}} \cdot \mathbf{q}) \frac{32\pi a^5}{((qa)^2 + 1)^3} \approx \frac{ie\hbar\omega_{\text{in}}}{\sqrt{\pi a^3}} (\epsilon_{\lambda_{\text{in}}} \cdot \mathbf{k}_f) \frac{32\pi a^5}{(k_f a)^6},$$

где ввели  $\mathbf{q} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{k}_{\text{in}} - \mathbf{k}_f$  и воспользовались приближением

$$\frac{(\hbar k_f)^2}{2m} = \hbar\omega + (-W_{\text{ион}}) \approx \hbar\omega, \quad k_{\text{in}} \ll k_f, \quad \Rightarrow \quad \mathbf{q} \approx -\mathbf{k}_f.$$

**Усреднение.** Вычислим усредненное по поляризациям значение

$$|(\epsilon_{\lambda_{\text{in}}} \cdot \mathbf{k}_f)|^2 = \frac{1}{2} \sum_{\lambda=1}^2 (\epsilon_{\lambda_{\text{in}}} \cdot \mathbf{k}_f) (\epsilon_{\lambda_{\text{in}}}^* \cdot \mathbf{k}_f) = \frac{1}{2} k_f^\alpha k_f^\beta \sum \epsilon_\lambda^\alpha \bar{\epsilon}_\lambda^\beta = \frac{1}{2} k_f^\alpha k_f^\beta \left( \delta^{\alpha\beta} - \frac{k_{\text{in}}^\alpha k_{\text{in}}^\beta}{k_{\text{in}}^2} \right) = \frac{1}{2} (k_f^2 - \frac{(\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{k}_{\text{in}})}{k_{\text{in}}^2}),$$

то есть просто часть, ортогональная  $\mathbf{k}_{\text{in}}$ , что можно было сказать с самого начала. Здесь воспользовались

$$\epsilon_\lambda \epsilon_\lambda^* = 1, \Rightarrow \epsilon_\lambda^\alpha \bar{\epsilon}_\lambda^\alpha = 2, \quad \epsilon_\lambda \perp \mathbf{k}_{\text{in}}.$$

Вводя сферические координаты с осью  $Oz$  вдоль  $\mathbf{k}_{\text{in}}$ , приходим к выражению

$$|(\epsilon_{\lambda_{\text{in}}} \cdot \mathbf{k}_f)|^2 = \frac{1}{2} k_f^2 (1 - \cos^2 \theta).$$

**Сечение рассеяния.** Теперь подставляем вычисленный выражения в формулу для полного сечения:

$$\int d\sigma = \int \frac{dw_{fi}}{2\hbar\omega c} = \frac{1}{2\pi\hbar\omega c} \frac{2\pi}{\hbar} \int_0^\infty \frac{k_f^2 dk_f}{(2\pi)^3} 2\pi \int_{-1}^1 d\cos\theta \delta\left(\hbar\omega - \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m}\right) \frac{k_f^2}{2} (1 - \cos^2 \theta) \left(\frac{32\pi a^5}{(k_f a)^6}\right)^2 \frac{(e\hbar\omega)^2}{\pi a^3},$$

откуда получаем выражения для  $\sigma_{\text{tot}}$ :

$$\sigma_{\text{tot}} = \int d\sigma = \frac{2^8}{3} 4\pi a^2 \left(\frac{W_{\text{ион}}}{\hbar\omega}\right)^{7/2}, \quad W_{\text{ион}} = \text{Ry} = \frac{e^2}{2a}.$$