

ЗАДАНИЕ ПО КУРСУ «КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА II»

Автор заметок: Хоружий Кирилл

От: 11 февраля 2022 г.

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 Δ_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

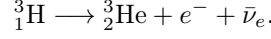
$$\Delta_1 = \langle \psi_1 | d_1^\alpha | \psi_1 \rangle \langle \psi_2 | d_2^\beta | \psi_2 \rangle \delta_{\alpha\beta} = 0.$$

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

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

$$U = \begin{cases} -e^2/r, & r \geq r_0 \\ e^2 r^2 / 2r_0^3 + C_1 e, & r_1 \leq r_0 \end{cases} \quad \Rightarrow \quad C_1 = -\frac{3}{2} \frac{e}{r_0}.$$

Итого, искомый потенциал

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

Кванты. Поправку можем найти, как

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

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 α_{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 ψ_{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 σ_+ 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 σ_{\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 σ , 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

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

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

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

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 **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.