

ЗАДАЧИ К ЭКЗАМЕНУ «КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА II»

Авторы заметок: Хоружий Кирилл
Примак Евгений

От: 23 мая 2022 г.

Содержание

№1. Линейный эффект Штарка в атоме водорода	2
№2. Матричный элемент оператора эволюции для свободной частицы	2
№3. Функционал гармонического осциллятора	3
№4, 5. Спиновые состояния	3
№6. Сумма по поляризациям спиноров Дирака	4
№7, 8, 9. Термы оболочки	4
№10. Аномальный эффект Зеемана	4
14. Время жизни уровня	4
№15. Эффект Рамзауэра	5
№16. Рассеяние тождественных частиц	5
№18. Фазы рассеяния	5
№19. Рассеяние в борновском приближении	6

№1. Линейный эффект Штарка в атоме водорода

Перепишем интегралы в сферических гармониках. Теперь рассмотрим возмущение, вила

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

Известно, что $n = 2$, тогда вырождение $n^2 = 4$. Можем явно выписать несколько функций

$$|200\rangle = \frac{2}{\sqrt{4\pi}} \left(\frac{z}{2a}\right)^{3/2} e^{-r/2a} \left(1 - \frac{r}{2a}\right),$$

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

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

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

№2. Матричный элемент оператора эволюции для свободной частицы

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

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

Вспоминая, 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.

№3. Функционал гармонического осциллятора

Рассмотрим действие, вида

$$S = \frac{1}{2} \int_{x'}^{x''} dt \, q(t) \hat{\Gamma} q(t) + \int_{x'}^{x''} dt \, j(t) q(t),$$

где верно, что $\hat{\Gamma} = \hat{\Gamma}^\dagger$.

Сделаем замену переменных в известном интеграле

$$Z[j] = \mathcal{N} \int \mathcal{D}q \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(t', t'', j)\right), \quad q(t) \rightarrow \tilde{q}(t) = q(t) - \mathcal{G}^{(1)}(t), \quad \hat{\Gamma} \mathcal{G}^{(1)}(t) = 0.$$

Нам поможет, что $\mathcal{G}^{(1)}(t) \hat{\Gamma} = (\hat{\Gamma} \mathcal{G}^{(1)}(t))^\dagger$, тогда

$$S = \frac{1}{2} \int dt \, (\tilde{q}(t) + \mathcal{G}^{(1)}(t)) \Gamma (\tilde{q}(t) + \mathcal{G}^{(1)}(t)) + \int dt \, j(t) (\tilde{q}(t) + \mathcal{G}^{(1)}(t)).$$

Подставляя в Z , находим

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

Теперь делаем замену $\tilde{q} \rightarrow \bar{q} = \tilde{q} + \hat{\Gamma}^{-1} j(t)$. Тогда

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

тогда для функционального интеграла получаем

$$Z[j] = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} dt \, \left(j(t) \mathcal{G}^{(1)}(t) - \frac{1}{2} j(t) \hat{\Gamma}^{-1} j(t)\right)\right) \times \mathcal{N} \int \mathcal{D}\bar{q} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} dt \, \frac{1}{2} \bar{q} \hat{\Gamma} \bar{q}\right),$$

где последний множитель может быть представлен в виде $\exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathcal{G}_0\right)$:

$$Z[j] = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left[\mathcal{G}_0 + \dots + \dots \right]\right) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} G[j]\right),$$

что и требовалось доказать.

№4, 5. Спиновые состояния

Два электрона. Для системы из двух электронов возможны конфигурации

$$\begin{aligned} S = 1, & \quad |1, +1\rangle = |++\rangle, \\ & \quad |1, -1\rangle = |--\rangle, \\ & \quad |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle + |-+\rangle) \\ S = 0, & \quad |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle). \end{aligned}$$

Для вывода полезно помнить, что

$$\hat{j}_\pm |j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) \pm m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle,$$

и заметить, что $S = 0$ нечетное по перестановкам, $S = 1$ четно по перестановкам.

Гелий. Для двух протонов (фермионов) в основном состоянии $l = 0$, откуда $(-1)^0 = 1$, а значит спиновая часть должна быть антисимметрична

$$|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle).$$

Аналогично верно для нейтронов (фермионов) $|n\rangle$.

В обще случае для $l \neq 0$ можем записать

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2} (|+-\rangle + (-1)^{l+1} |-+\rangle) \otimes (|+-\rangle + (-1)^{l+1} |-+\rangle).$$

№6. Сумма по поляризациям спиноров Дирака

Для покоящихся спиноров сумму по поляризациям

$$\Pi(\mathbf{0}) = \sum_{\lambda} u_{\lambda}(\mathbf{0}) \bar{u}_{\lambda}(\mathbf{0})$$

можем вычислить в явном виде, как прямое произведение

$$\Pi(\mathbf{0}) = mc(1, 0, 1, 0) \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + mc(0, 1, 0, 1) \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = mc \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

В ковариантном виде

$$\Pi(\mathbf{0}) = mc(\gamma_0 + 1) = (\not{k} + mc), \quad k_{\mu} = (mc, \mathbf{0}).$$

Можем посчитать (посчитать), что $\Lambda \not{k} \Lambda^{-1} \rightarrow \not{p}$, откуда сразу находим

$$\Pi(\mathbf{p}) = (\not{p} + mc), \quad \Pi^c(\mathbf{p}) = \sum_{\lambda} v_{\lambda}(\mathbf{p}) \bar{v}_{\lambda}(\mathbf{p}) = (\not{p} - mc),$$

где $\not{p} = p_{\mu} \gamma^{\mu} = p_0 \gamma_0 - \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{p}$.

№7, 8, 9. Термы оболочки

Кремний $2p^2$. По правилам Хунда конфигурация незаполненной части $2p^2$ будет вида: $\square \uparrow \uparrow$, а значит можем найти $J = |L - S| = 0$. Основное состояние 3P_0 .

Сера $2p^4$. Незаполненной является оболочка $2p^4$, для которой 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 . SPD.

Фосфор $2p^3$. 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. SPD.

№10. Аномальный эффект Зеемана

Расщепление будет происходить на величину

$$E = \hbar \Omega g_{LSJ} M_J, \quad g = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}, \quad \Omega = \frac{eH}{2mc}.$$

Вспомним правила отбора $|\Delta J| \leq 1$, $|\Delta M_s| \leq 1$, $\Delta S = 0$, а также про смену четности E1 перехода и запрет на $J = J' = 0$.

Для уровня ${}^2P_{3/2}$ фактор Ланде равен $4/3$. Осталось отдельно рассмотреть переходы с ${}^2S_{1/2}$ на ${}^2P_{1/2}$ и с ${}^2S_{1/2}$ на ${}^2P_{3/2}$, что проще сделать руками, чем приводить здесь.

14. Время жизни уровня

Уже считали для атома водорода

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2}{3c^3} \omega_f^3 |d_{fi}|^2 \frac{1}{\hbar}.$$

Ион гелия – водородоподобный атом, с отличным радиусом Бора:

$$a_H = \frac{\hbar^2}{me^2}, \quad a_{He} = \frac{\hbar^2}{me^2 Z} = \frac{\hbar^2}{me^2 2}, \quad \Rightarrow \quad d_{fi}^{He} = \frac{1}{Z} d_{fi}.$$

Аналогично для частоты

$$\omega_f \sim e^4 \sim \frac{1}{a^2}, \quad \Rightarrow \quad \omega_f^{He} \sim Z^2 \omega_f.$$

Таким образом находим, что

$$\tau_{\text{He}} = \frac{1}{Z^4} \tau_{\text{H}} = 10^{-10} \text{ с.}$$

№15. Эффект Рамзауэра

Найдём сечение рассеяния медленных частиц на глубокой сферической яме радиуса a_0 . Потенциал

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & r \leq a_0, \\ 0, & r > a_0. \end{cases}$$

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 $r \leq a$

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

Решение для радиальной волновой функции при $l = 0$ запишется в виде

$$R_{k0}(r) = \begin{cases} A \frac{1}{k_u r} \sin(k_u r), & k_u^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E + U_0), \quad r \leq a_0, \\ B \frac{1}{kr} \sin(kr + \delta_0) & k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E, \quad r > a_0, \end{cases}$$

где A, B определяются из непрерывности $R_{k0}(r)$. Фазу можем найти из

$$\left. \frac{R'_{k0}(r)}{R_{k0}(r)} \right|_{r=a_0-0} = \left. \frac{R'_{k0}(r)}{R_{k0}(r)} \right|_{r=a_0+0},$$

Подставляя $R_{k0}(r)$, находим

$$\text{tg}(ka_0 + \delta_0) = \frac{k}{k_u} \text{tg}(k_u a_0), \quad \Rightarrow \quad \delta_0 = -ka_0 + \arctg\left(\frac{k}{k_u} \text{tg}(k_u a_0)\right).$$

Рассмотрим случай $\text{tg}(k_u a) \rightarrow \pm\infty$. Тогда $\delta_0 \approx \arctg(\pm\infty) = \pm\frac{\pi}{2}$, что ещё называют резонансным рассеянием, так как $\sin \delta_0 = \pm 1$. Также посмотрим на $\frac{\text{tg}(\bar{k}a)}{\bar{k}a} \approx 1$, тогда $\delta_0 \approx 0$, и получается $k_u a \ll 1$ и $f_0 \rightarrow 0$ – эффект Рамзауэра.

№16. Рассеяние тождественных частиц

Для двух тождественных частиц можем написать Ψ 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.

α -частицы. Спин α -частицы равен нулю, так что говорим про Ψ для бозонов, симметричную по перестановкам. Тогда асимптотика на бесконечности имеет вид

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

Тогда сечение рассеяния может быть записано в виде

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

№18. Фазы рассеяния

Изменить константу $\beta \rightarrow \frac{\hbar^2 \beta^2}{2m}$. Для потенциала, вида

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

найдем фазы рассеяния δ_l .

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

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

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.

№19. Рассеяние в борновском приближении

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

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

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

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

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

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

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

В пределе $\kappa \rightarrow 0$ можем получить резерфодовское сечение на отталкивающем кулоновском центре:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{e^4}{4E^2} \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}.$$