Задание по курсу «Квантовая механика II»

Автор заметок: Хоружий Кирилл

От: *11 июня 2022 г.*

Первое задание

T1

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

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

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

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

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:

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

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

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

T2

Атом-ион. Рассмоотрим возмущение, вида

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

Живём в парадигме

$$\hat{\mathbb{P}}\,\psi_{\text{at}} = \lambda_p \psi_{\text{at}}, \qquad \lambda_p = \pm 1, \qquad \hat{\mathbb{P}}\,\hat{\boldsymbol{r}} = -\hat{\boldsymbol{r}}\hat{\mathbb{P}}, \qquad \hat{\mathbb{P}}^2 = \mathbb{1}.$$

Для начала заметим, что

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

Для второй поправки

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

Атом-атом. Возмущение теперь вида

$$\hat{V} = -\frac{1}{r^3}\left(3(\boldsymbol{d}_1 \cdot \boldsymbol{n})(\boldsymbol{d}_2 \cdot \boldsymbol{n}) - \boldsymbol{d}_1 \cdot \boldsymbol{d}_2\right), \qquad \boldsymbol{n} = \frac{\boldsymbol{r}}{r}.$$

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

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

T3

Рассмотрим процесс, вида

$$
{}^3_1\mathrm{H} \longrightarrow {}^3_2\mathrm{He} + e^- + \bar{\nu}_e.
$$

Энкергия в основном состоянии

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

Волновые функции:

$$
\psi^H_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}, \qquad \psi^{He}_{100} = \sqrt{\frac{2^3}{\pi a^3}} e^{-2r/a}.
$$

При $n = 2$: $l = 0, \pm 1$, тогда

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

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

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

Тогда искомая вероятность

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

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

T4

Продолжаем работать с основным состоянием водорода, а значит

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

Электростатика. Вспоминаем, что

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

Расписываем лапласиан в сферических координатах:

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

а значит

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

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

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

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

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

А значит, интегрируя, находим

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

T5

Помним, что

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

Также помним, что

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

При этом мы знаем, что

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

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

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

Подставляя, находим

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

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

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

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

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

Сопостовляя с поляризуемостью, находим

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

T6

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,

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

Осталось посчитать

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

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

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

Решая секулярное уравнение, находим

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

Энергии расщепления

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

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 систеы:

$$
\hat{H} = -\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{H}, \qquad \boldsymbol{\mu} = \frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{s}g,
$$

где $g=2$. Магнитное поле

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

Тогда $\hat{H}$ перепишется в виде

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

введем обозначения

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

Вводя $\sigma_\pm$ переходим к

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

Далее будем решать нестационаное уравнение Шрёдингера

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

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

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

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

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

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

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

Перехоим к базису, диагонализирующем $\hat{\tilde{H}}$. 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

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

Тогда

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

Теперь вводим собственные вектора

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

Собственно, сами собственные векторы

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

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

$$S^{-1} = \frac{1}{2\Omega'(\Omega - \omega\cos\theta)}\begin{pmatrix}\Omega' & -\Omega_0 + \omega + \Omega - \omega\cos\omega t \\ -\Omega' & \Omega_0 - \omega + \Omega - \omega\cos\theta\end{pmatrix}.$$

Тогда

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

Перемножая, находим

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

а искомая величина будет

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

Поляризация. Осталось найти

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

которое считать и считать, а получится

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

где было введено обозначение

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

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 поляризаця «следует» за $\boldsymbol{H}$.

Фаза Берри. Её можно посчитать, как

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

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

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

тогда искомая фаза Берри

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

Связь с телесным углом можны найти, посчитав

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

действительно пропорциональны.

T11

Матричный элемент. Найдём матричный элемент опратора эволюции для свободной частицы

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

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

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

Теперь интегрирование по импульсу тривиально:

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

где мы воспользовались

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

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

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

Введем для удобства

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

Тогда

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

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

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

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

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

Подставляя $\bar{q}$, находим

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

а значит

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

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

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

Второе задание

Уравнение Паули для позитрона

Известно, что для электрона можем записать уравнение Паули:

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

Для позитрона можем воспользоваться анзацем

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

Подставляем это в уравнение Дирака

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

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 получившеюся систему вида

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

Решая, находим
$$\varphi = -\frac{1}{1-\frac{\hat{\varepsilon}-e\Phi}{2mc^2}}\frac{(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\mathcal{P}})}{2mc}\chi = -(1+\hat{W})\frac{(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\mathcal{P}})}{2mc}\chi.$$
Теперь, кстати φ – малая компонента, χ – большая, при рассмотрении $\frac{v}{c}\ll 1$.

Вводя $\bar{\psi}=\psi^+\gamma^0$, получаем
$$c\bar{\psi}\left(\tilde{\mathcal{P}}-mc\right)\psi = \chi^+\left(\hat{\varepsilon}-e\Phi+\frac{1}{2m}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\mathcal{P}})(1+\hat{W})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\mathcal{P}})\right).$$
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
$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\mathcal{P}})^2 = \boldsymbol{\mathcal{P}}^2 + i\boldsymbol{\sigma}\cdot[\boldsymbol{\mathcal{P}}\times\boldsymbol{\mathcal{P}}].$$
Распишем покомпоненто
$$[\boldsymbol{\mathcal{P}}\times\boldsymbol{\mathcal{P}}]_\alpha = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\left(-i\hbar\partial_\beta-\tfrac{e}{c}A_\beta\right)\left(-i\hbar\partial_\gamma-\tfrac{e}{c}A_\gamma\right) = i\hbar\tfrac{e}{c}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\left(\partial_\beta A_\gamma\right),$$
откуда находим
$$[\boldsymbol{\mathcal{P}}\times\boldsymbol{\mathcal{P}}]_\alpha = i\hbar\tfrac{e}{c}\boldsymbol{\mathcal{H}}, \qquad (\mathrm{rot}\,\boldsymbol{A})_\alpha = \mathcal{H}_\alpha.$$

Таким образом можем записать действие:
$$S_{NR} = \int d^4x\ \chi^+\left(\hat{\varepsilon}-e\Phi+\frac{\boldsymbol{\mathcal{P}}^2}{2m}-\frac{e\hbar}{2mc}\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\mathcal{H}}\right)\right).$$
Варьируя действие, находим
$$i\hbar\partial_t\chi = \left(e\Phi-\frac{\boldsymbol{\mathcal{P}}^2}{2m}+\frac{e\hbar}{2mc}\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\mathcal{H}}\right)\right)\chi,$$
которое по идее есть Шрёдингер, вида $i\hbar\partial_t\chi = \hat{H}\chi$.

Нужно вспомнить, что у нас должа быть правильная спинорная метрика (переходим к другой киральности):
$$\chi_{NR} = i\sigma_2\chi^*.$$
Так что подставляя это наверх, находим
$$-i\hbar\partial_t\chi^* = (\ldots)\,\chi^*.$$
Воспользуемся свойством $\sigma_2\boldsymbol{\sigma}^*\sigma_2 = -\boldsymbol{\sigma}$. Домножая последнее уравнение на $i\sigma_2$, находим
$$i\hbar\partial_t\xi_{NR} = \left(\frac{\boldsymbol{\mathcal{P}}^2}{2m}-e\Phi+\frac{e\hbar}{2mc}g\left(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{\mathcal{H}}\right)\right)\chi_{NR}, \qquad g=2, \quad \boldsymbol{s}=\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}.$$

Правила Хунда

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

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

Правила Хунда: феноменология. Располагаем нерелятивисткие термы ^{2s+1}L по I правилу Хунда. Во-первых считаем, что $E\to\min$ при $s\to\max$. Далее меняем $E\to\min$ при $L\to\max$.

Правила Хунда: релятивистские поправки I. Спин-орбитальное взаимодействие вносит в незаполненные оболочки $(2^{2(2l+1)})$
$$V_{sl} = \sum_f \frac{e\hbar^2}{2m^2c^2}\frac{V'(r_f)}{r_f}\left(\boldsymbol{s}_f\cdot\boldsymbol{l}_f\right).$$

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

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

Считая скалярное произведение, находим

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

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:

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

Понятно, что

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

Можем рассматривать

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

Теперь рассматриваем орбитальный момент

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

где теперь выполняется

$$\tilde{\boldsymbol{L}} + \boldsymbol{L}_h = 0, \qquad \Rightarrow \qquad \langle V_{sl}\rangle_{LS} \approx \frac{1}{2}A^h_{SL}\left(\boldsymbol{S}_h cdot \boldsymbol{L}_h\right) = -\frac{1}{2}A_{SL}\left(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}\right).$$

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

T15

По определению

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

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

$$\begin{aligned}W^i &= -\tfrac{1}{2}\varepsilon^{i0jk}p_0S_{jk} - \varepsilon^{ij0k}p_jS_{0k} = \tfrac{1}{2}\varepsilon^{0ijk}p_0\hbar\varepsilon_{jkn}s^n - i\,\mathrm{sign}(\mathfrak{s})\varepsilon^{oijk}p_js_k\hbar = \\ &= \hbar\left(p_0s^i - i\,\mathrm{sign}(\mathfrak{s})\left[\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{s}\right]^i\right).\end{aligned}$$

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

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

где введены

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

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:

$$\chi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{a_H\sqrt{\pi}2^n n!}}\exp\left(-\frac{(y-y_0)^2}{2a_H^2}\right)H_n\left(\frac{y-y_0}{a_H}\right), \qquad a_H = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_{\mathcal{H}}}}.$$

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: $\square\;\boxed{\uparrow}\;\boxed{\uparrow}$, а значит можем найти $J = |L - S| = 0$.

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

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 $\square\;\boxed{\uparrow}\;\boxed{\uparrow\downarrow}$, и $^2\mathrm{D}_{3/2,5/2}$. Для $M_L = 1$ возможны конфигурации $\square\;\boxed{\uparrow\downarrow}\;\boxed{\uparrow}$ и $\boxed{\uparrow}\;\square\;\boxed{\uparrow\downarrow}$ с обозначениями $^2\mathrm{P}_{1/2,\,3/2}$. Наконец, для $M_L = 0$ возможны конфигурации $\boxed{\uparrow}\;\boxed{\uparrow}\;\boxed{\downarrow}$, $\boxed{\uparrow}\;\boxed{\downarrow}\;\boxed{\uparrow}$, $\boxed{\downarrow}\;\boxed{\uparrow}\;\boxed{\uparrow}$, не приводящие к новым независимым состояниям.

Ванадий. V: …3d^3 и конфигурация $\square\;\square\;\boxed{\uparrow}\;\boxed{\uparrow}\;\boxed{\uparrow}$ с обозначением $^4\mathrm{F}_{3/2}$.

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

Церий. Ce: …6s^2 5d^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 4f^1 5d^1 6s^2, является исключением из правил Хунда.

T29

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

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

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

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

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

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

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 $\sqrt{2mV_0}a \ll \hbar\sqrt{ka}$.

T30

Для потенциала, вида
$$V(r) = \frac{\beta}{r^2}, \qquad \beta > 0,$$
найдём фазы рассеняи δ_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 асмиптотику 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
$$f(\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left(e^{2i\delta_l} - 1\right)P_l(\cos\theta) \approx \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\delta_l P_l(\cos\theta) \approx -\frac{\pi m\beta}{\hbar^2 k}\sum_{l=0}^{\infty}P_l(\cos\theta).$$
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.

T31

Найдём сечение рассеяния для $ka \ll 1$, а значит доминирует s-рассеяние и p-рассеяние. Для потенциала
$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & r \leqslant a, \\ 0, & r > a. \end{cases}$$
Теперь
$$R_{k0} = \frac{1}{r}u(r), \qquad u(0) = 0, \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}u'' + Vu = Eu.$$
Для $r > a$ $u'' + k^2 u = 0$, тогда
$$u_{\mathrm{II}} = A\sin(kr + \delta_0).$$
Для $r \leqslant a$
$$u'' + (k^2+\varkappa^2)u = 0, \qquad \tilde{k}^2 \overset{\text{def}}{=} k^2 + \varkappa^2, \qquad U_0 = \frac{\hbar^2\varkappa^2}{2m}, \qquad \Rightarrow \qquad U_{\mathrm{I}} = B\sin(\tilde{k}r).$$

Сшиваем на границах:
$$\frac{U_\mathrm{I}'}{U_\mathrm{I}} = \frac{U_\mathrm{II}'}{U_\mathrm{II}}, \quad \Rightarrow \quad \mathrm{tg}(ka+\delta_0) = \frac{k}{\tilde{k}}\,\mathrm{tg}(\tilde{k}a), \quad \Rightarrow \quad \delta_0 = -ka + \mathrm{arctg}\left(\tfrac{k}{\tilde{k}}\,\mathrm{tg}(\tilde{k}a)\right).$$
Рассмотрим случай $\frac{k}{\tilde{k}}\,\mathrm{tg}(\tilde{k}a) \ll ka \ll 1$, а тогда $\delta_0 \approx -ka$, а значит $f_0 = \frac{1}{k} e^{i\delta_0} \sin\delta_0 \approx -a$.

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

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

При барьере $\tilde{k} \to i\tilde{k}$, получим уравнения
$$\delta_0 = -ka + \mathrm{arctg}\left(\frac{ka}{\tilde{k}a}\,\mathrm{th}(\tilde{k}a)\right).$$

T32

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

Записываем оптическую теорему
$$\sigma_\mathrm{tot} = \frac{4\pi}{k}\sum_l \mathrm{Im}\, f_l.$$
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
$$\sigma_\mathrm{tot} = \frac{4\pi}{k}\sum_{l=0}^{ka}(2l+1)\frac{1}{2k} = \frac{2\pi}{k^2}(ka+1)^2 = 2\pi a^2.$$

I. Рассмотрим непроницаемую сферу
$$U(r) = \begin{cases} 0, & r \leqslant a, \\ \infty, & r > a. \end{cases}$$
Вспоминаем
$$R_{kl} \approx \frac{c_l}{r}\sin\left(kr - \tfrac{\pi l}{2} + \delta_l\right).$$
Верно, что $R_{kl}|_{r=a} = 0$:
$$ka - \frac{\pi l}{2} + \delta_l = \pi n \to 0, \quad \Rightarrow \quad \delta_l = \frac{\pi l}{2} - ka.$$
Находим сечение рассеяния:
$$f_l = \frac{2l+1}{k} e^{i\delta_l}\sin\delta_l.$$
Пользуемся оптической теоремой, находим
$$\mathrm{Im}\, f_l = \frac{2l+1}{2k} - \frac{2l+1}{2k}\cos\left(\pi l - 2ka\right).$$
Вклад от первого слагаемого дает половину $\sigma_\mathrm{geom} = 4\pi a^2$. Для расчёта второго слагаемого рассмотрим четные/нечетные значения l:
$$\sigma_\text{чёт} = \frac{4\pi}{k}\sum_{m=0}^{ka/2}(2l+1)\frac{\cos(2ka)}{2k} = \frac{2\pi}{k^2}\cos(2ka)(ka+1)\frac{ka+1}{2}, \qquad l = 2m.$$
Теперь нечётный вклад $l = 2m+1$:
$$\sigma_\text{нечет} = \frac{2p}{k}\sum_{m=0}^{ka/2-1}(4m+3)\frac{\cos(2ka)}{2k} = \frac{2\pi}{k^2}\cos(2ka)(ka-1)\frac{ka}{2}.$$
Таким образом находим
$$\sigma_\text{чёт} - \sigma_\text{неч} = \frac{\pi}{k^2}\cos(2ka)\left(\frac{5}{2}ka + 2\right).$$

[1] Вообще верно, что $\hbar k \cdot b = \hbar l$, где b – прицельный параметр.

Однако в финальное выражение входит только первое слагаемое

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

T33

Для двух тождественных частиц можем написать Ψ в виде

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

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

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

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

Тогда сечение рассеяние может быть записано в виде

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

Протоны. Рассмотрим теперь случай фермионов с антисимметричной по перестановке Ψ. Для состояния с $s_1 + s_2 = S = 0$ χ антисимметрично, а значит ψ симметрична, то есть совпадает с рассмотренным случаем для α-частиц.

Для $S = 1$ спиновая функция χ симметрично, тогда ψ антисимметрична:

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

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

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

T34

Найдём сечение фотоэффекта для атома водорода. Рассмотрим реакцию

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

где считаем электрон свободной нерелятивистской частицей. По условию энергия γ-кванта $\hbar\omega \gg \mathrm{Ry}$. 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

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

Из правила Ферми:

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

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

Квантованное поле. Будем решать задачу в дипольном приближение:

$$\hat{V} = -\boldsymbol{d}\cdot\boldsymbol{E}, \qquad \boldsymbol{d} = -e\boldsymbol{r}.$$

Так как энергия поглощается из ЭМ поля, то рассматриваем

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

Для свободных полей

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

Матричный элемент. Таким образом можем найти матричный элемент

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

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

$$\langle 0|\hat{\boldsymbol{E}}|\boldsymbol{k}_{\text{in}},\, \lambda_{\text{in}}\rangle = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{i}{2}\left(\boldsymbol{\epsilon}_\lambda e^{-i\omega t+i\boldsymbol{kr}}\langle 0|\hat{a}|\boldsymbol{k}_{\text{in}},\, \lambda_{\text{in}}\rangle + 0\right),$$

где подставляя условие нормировки

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

находим выражение для матричного элемента поля

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

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

$$V_{fi} = -i\hbar\omega_{\text{in}}e\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\int d^3r\; e^{i\boldsymbol{qr}-r/a}(\boldsymbol{\epsilon}_{\lambda_{\text{in}}}\cdot\boldsymbol{r}) = -\frac{ie\hbar\omega_{\text{in}}}{\sqrt{\pi a^3}}\left(\boldsymbol{\epsilon}_{\lambda_{\text{in}}}\cdot\boldsymbol{q}\right)\frac{32\pi a^5}{\left((qa)^2+1\right)^3} \approx \frac{ie\hbar\omega_{\text{in}}}{\sqrt{\pi a^3}}\left(\boldsymbol{\epsilon}_{\lambda_{\text{in}}}\cdot\boldsymbol{k}_{\text{f}}\right)\frac{32\pi a^5}{(k_{\text{f}}a)^6},$$

где ввели $\boldsymbol{q} \overset{\text{def}}{=} \boldsymbol{k}_{\text{in}} - \boldsymbol{k}_{\text{f}}$ и воспользовались приближением

$$\frac{(\hbar k_{\text{f}})^2}{2m} = \hbar\omega + (-W_{\text{ион}}) \approx \hbar\omega, \qquad k_{\text{in}} \ll k_{\text{f}}, \qquad \Rightarrow \qquad \boldsymbol{q} \approx -\boldsymbol{k}_{\text{f}}.$$

Усреднение. Вычислим усредненное по поляризациям значение

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

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

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

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

$$|(\boldsymbol{\epsilon}_{\lambda_{\text{in}}}\cdot\boldsymbol{k}_{\text{f}})|^2 = \frac{1}{2}k_{\text{f}}^2(1-\cos^2\theta).$$

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

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

откуда получаем выражения для σ_{tot}:

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