Задание по курсу «Квантовая механика II»

Автор заметок: Хоружий Кирилл

От: *4 февраля 2022 г.*

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:

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

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 $w_{100}/w_{200} \approx 2.8$.

T4

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, как

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

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

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

Ищем решение в виде

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

Подставляя, находим

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

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

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