Задание по курсу «Квантовая механика II»

Автор заметок: Хоружий Кирилл

От: *22 апреля 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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Действительно,

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

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
$$\sigma_\pm(0)=\sigma_\pm, \qquad \Rightarrow \qquad \sigma_\pm(t)=\sigma_\pm e^{\pm i\tilde\Omega t}.$$
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
$$\Omega_0=\frac{|e|H_0}{mc}, \qquad \Omega'=\frac{|e|h}{mc}, \qquad \Omega=\frac{|e|H}{mc}, \qquad \Rightarrow \qquad \frac{\Omega_0}{\Omega}=\frac{H_0}{H}=\cos\theta.$$
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
$$\begin{pmatrix}E_1-E_\pm & V \\ V & -E_1-E_\pm\end{pmatrix}\boldsymbol{v}=0, \qquad \Rightarrow \qquad \boldsymbol{v}=\frac{2}{\hbar}\begin{pmatrix}E_1+E_\pm \\ V\end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix}\Omega_0-\omega\pm(\Omega-\omega\cos\theta) \\ \Omega'\end{pmatrix}.$$
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

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

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

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

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

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

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

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

Уравнение Паули для позитрона

Известно, что для электрона можем записать уравнение Паули:

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

Для позитрона можем воспользоваться анзацем

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

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

$$[\boldsymbol{\mathcal{P}}\times\boldsymbol{\mathcal{P}}]_\alpha = i\hbar\tfrac{e}{c}\boldsymbol{\mathcal{H}}, \qquad (\operatorname{rot}\boldsymbol{A})_\alpha = \mathcal{H}_\alpha.$$

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

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

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 $J = L+S$.