КАЗАНСКИЙ ОРДЕНА ЛЕНИНА И ОРДЕНА ТРУДОВОГО
КРАСНОГО ЗНАМЕНИ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени В. И. УЛЬЯНОВА-ЛЕНИНА

Кафедра теоретической физики

МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

КАЗАНЬ - 1990

Печатается

по постановлению Учебно-методической

комиссии физического факультета

Составители -

Н.Г.Колоскова, А.Л.Ларионов, С.Л.Царевский

Редактор -

Б.И.Кочелаев

В квантовой механике исходят из следующих основных положений.

1. Каждой физической величине сопоставляется линейный и эрмитовый оператор $\hat{L}$.

2. Каждому состоянию физической системы сопоставляется нормированная волновая функция Ψ.

3. Физическая величина L может принимать только собственные значения оператора $\hat{L}$.

4. Математическое ожидание $\langle L \rangle$ величины L в состоянии Ψ определяется диагональным матричным элементом

$$\langle L \rangle = \int \Psi^* \hat{L} \Psi \, d\tau.$$

5. Сопоставление оператора физической величины L, имеющей классический аналог, т.е. являющейся функцией классических переменных $L(x_i, p_i)$, производится заменой классических переменных на операторы $\hat{x}_i$, $\hat{p}_i$.

6. В выражении $\frac{d}{dt}\langle \Psi_1 | \hat{L} | \Psi_2 \rangle$ зависимость от времени можно отнести как к операторам, так и к волновым функциям. Если зависят от времени только операторы, то

$$\frac{d}{dt}\hat{L} = -\frac{i}{\hbar}\left[\hat{L}, \hat{\mathcal{H}}\right] + \frac{\partial \hat{L}}{\partial t}.$$

Это представление Гейзенберга.
Если от времени зависят только функции, то

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}} \Psi.$$

Это представление Шредингера.
В представлении взаимодействия от времени зависят как функции, так и операторы.

7. Стационарные состояния описываются собственными функциями гамильтониана $\hat{\mathcal{H}}$, а множество собственных значений оператора $\hat{\mathcal{H}}$ образует энергетический спектр.

8. Для величин, операторы которых не коммутируют, имеет место соотношение неопределенностей

$$\left\langle (\Delta L)^2 \right\rangle \left\langle (\Delta M)^2 \right\rangle \geq \frac{1}{4} \left\langle \left| [\hat{L}, \hat{M}] \right| \right\rangle^2.$$

9. В случае дискретного невырожденного спектра поправки теории возмущений определяются формулами

$$E_n^{(1)} = \langle n|V|n\rangle, \quad E_n^{(2)} = \sum_m{}' \frac{|\langle n|V|m\rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0},$$

$$C_{mn}^{(1)} = \frac{\langle m|V|n\rangle}{E_n^0 - E_m^0}.$$

Для вырожденного уровня поправки I-го порядка к энергии и правильные линейные комбинации функций определяют из секулярного уравнения

$$Det\left| V_{mn} - E^{(1)}\delta_{mn} \right| = 0, \quad V_{mn} = \langle m|V|n\rangle.$$

I0. В вариационном методе для нахождения собственных функций и собственных значений методом линейных комбинаций (метод МО ЛКАО) решают систему уравнений:

$$\sum_{k=1}^{n} (\mathcal{H}_{ik} - ES_{ik}) C_k = 0, \quad \Psi = \sum_k C_k \Psi_k,$$

$$S_{ik} = \langle \Psi_i | \Psi_k \rangle, \quad \mathcal{H}_{ik} = \langle \Psi_i | \hat{\mathcal{H}} | \Psi_k \rangle.$$

II. ВКБ - спектр находят из соотношения

$$\int_a^b \sqrt{2\mu [E_n - U(x)]}\, dx = \pi\hbar \left(n + \frac{1}{2}\right).$$

I2. Если гамильтониан системы явно зависит от времени, то вероятность перехода из одного стационарного состояния в другое в первом приближении равна

$$W_{kn}^{(1)} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int V_{kn}(t) e^{i\omega_{kn} t} dt \right|^2.$$

I3. Нормированная функция системы тождественных фермионов может быть записана в виде детерминанта, составленного из одночастичных волновых функций:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} Det \left| \Psi_{\alpha_i}(q_k) \right|.$$

I4. Гамильтониан свободного электромагнитного поля во вторично квантованном виде имеет вид

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_k \frac{\hbar\omega_k}{2} \left(\hat{a}_k \hat{a}_k^+ + \hat{a}_k^+ \hat{a}_k \right) = \sum_k \hbar\omega_k \left(n_k + \frac{1}{2} \right).$$

ОТВЕТЫ И РЕШЕНИЯ

I.3. $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$.

I.4. да; нет, нет,...

I.7 $(2-x^2)\sin x + 4x\cos x$; $(1-x)\sin x + 3x\cos x$;

$(2+8x+4x^2)\exp(2x)$; $(1+6x+4x^2)\exp(2x)$.

I.I0. $(\hat{A} - \lambda\hat{B})^{-I} = \hat{A}^{-I}\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n(\hat{B}\hat{A}^{-I})^n$.

I.II. $-\frac{\partial}{\partial x}$.

I.I2. $(-1)^n\frac{\partial^n}{\partial x^n}$.

I.I3. $\hat{T}^{+}_{\vec{a}} = \exp(-\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{p}}\vec{a})$.

I.I4. $\exp(i\alpha\frac{\partial}{\partial y})$ (если $\alpha = \alpha^*$).

I.I6. $-i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}$.

I.I7. I; 0; $i\hat{p}_z$; 0; iz ; $i\hat{l}_z$; 0 ; $2\frac{\partial}{\partial x}$.

I.20. $[\hat{A}\hat{B},\hat{C}] = [\hat{A},\hat{C}]\hat{B} + \hat{A}[\hat{B},\hat{C}]$.

I.22. $[\hat{a},\hat{a}^+] = I$.

I.25. $\exp(\hat{A})\cdot\exp\left(\int_0^1 d\gamma\, e^{-\gamma\hat{A}}\alpha\hat{B}\, e^{\gamma\hat{A}}\right)\int_0^1 d\gamma\, e^{-\gamma\hat{A}}\hat{B}\, e^{\gamma\hat{A}}$.

I.26. $a\exp(ia\hat{p}/\hbar)$; $b\exp(ibq/\hbar)$.

I.27. $e^{\alpha q}\cdot e^{\beta\hat{p}}\exp(-i\hbar\alpha\beta/2)$.

I.3I б) $C\exp[\frac{\lambda}{a}\exp(i\alpha x)]$;

в) $C\exp[\frac{\alpha q^2}{2\hbar} + i\frac{\lambda q}{\hbar}]$;

д) $C\exp(im\varphi)$, $\lambda = im$, $m = 0, \pm I, \pm 2, ...$

е) $C\exp(im\varphi)$, $\lambda = i\,\mathrm{sh}\, m$, $m = 0, \pm I, \pm 2, ..$

ж) $C\exp(im\varphi)$, $\lambda = \mathrm{ch}\, m$, $m = 0, \pm I, ...$

з) $C\exp(im\varphi)$, $\lambda = \exp(-\alpha m)$,

и) $C\sin(\beta x)/x$, $\lambda = -\beta^2 < 0$, β - любое веществен-

ное число. Указание: сделать замену $\psi = \chi(x)/x$.

I.33. $C\exp(im\varphi)$; $\exp(izp_z/\hbar)$; $Y_{lm}(\vartheta,\alpha)$; $c\,\delta(x-\lambda)\,e^{i\frac{yp_y}{\hbar}}$

$C\exp[i(\vec{r}\vec{p})/\hbar]$; $C_-\sin(\sqrt{2mE}\cdot x/\hbar)$, $C_+\cos(\sqrt{2mE}\,x/\hbar)$.

I.35. $$\psi_{\vec{p}_0} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_0\vec{r})\right];$$

$$\psi_{E_0} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar\frac{p}{m}}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}px\right),\ E_0 = \frac{p^2}{2m},$$

(Для одномерного движения);

$$\psi_{\vec{k}_0} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\exp\left[i(\vec{k}_0\vec{r})\right];\ \psi_{\vec{p}_0} = \frac{1}{\sqrt{V}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_0\vec{r})\right],$$

V - объем ящика.

I.36. $a_l = \frac{2l+1}{2}P_l(\cos\vartheta_0)\sin\vartheta_0$;

$a_{lm} = Y^*_{lm}(\vartheta_0,\varphi_0)\sin\vartheta_0$.

I.38. $P_n P_m + P_m P_n = 0$.

I.40. $P_{s_i l_i} = P_{s_i} P_{l_i}$.

I.4I. Указание: показать, что $\hat{a}\hat{P}_0|0\rangle = 0$

$P_n = \sum_{k>0}(-1)^k\frac{1}{k!}(\hat{a}^+)^{n+k}\hat{a}^k$.

2.5. Если $\hat{L}_z|m\rangle = m|m\rangle$, то $\langle L_z^2\rangle = m^2$,

$\langle L^2_{x,y}\rangle = \frac{1}{2}[L(L+1) - m^2]$.

2.7. $2\hbar^2$.

2.8. I/2.

2.9. I2 $\hbar^2$ и 2 $\hbar^2$; 8/I5.

2.I0. $|A| = 1/a\sqrt{\pi}$, область локализации $\sim a$ в окрестности т. $x=a$; $j_x = |A|^2 \frac{\hbar k_0}{m} \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right)$.

2.II. $\Delta k \sim a^{-1}$.

2.I2. $\Psi(x,t) = \frac{A}{\sqrt{1+i\hbar t/ma^2}} \exp\left[-\frac{x^2 - 2ia^2 x k_0 + i\hbar a^2 k_0^2 t/\hbar}{2a^2(1+i\hbar t/ma^2)}\right]$,

$$j(x,t) = \frac{\hbar k_0}{m} \cdot \frac{1+\hbar t x/ma^4 k_0}{1+\hbar^2 t^2/m^2 a^4} \rho(x,t), \quad \rho(x,t) = |\Psi(x,t)|^2.$$

2.I3. 0; $\hbar k_0$; $a^2/2$; $\hbar^2/2a^2$.

2.I7. 0; 0.

3.I. $\hbar^2 (n+\frac{1}{2})^2$.

3.2. a^2; $Me^2/3a$; $\langle x^2\rangle \cdot \langle P_x\rangle^2 = \frac{\hbar^2}{3}$.

3.3. Указание: вначале следует убедиться, что $\langle p\rangle = \langle q\rangle = 0$, так что $\langle q^2\rangle = \langle \Delta q^2\rangle$ и $\langle p^2\rangle = \langle \Delta p^2\rangle$.

3.4. $\hat{U} = e^{\frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}\left[(\bar{p} - i\omega\bar{q})\hat{a}^+ + (\bar{p} + i\omega\bar{q})\hat{a}\right]}$

3.5. $\hat{a}|\bar{q},\bar{p}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}(\omega\bar{q} + i\bar{p})|\bar{q},\bar{p}\rangle$.

4.5. Нет.

4.9. $\vartheta = 2\beta$, $\varphi = -\gamma - \alpha$.

4.I0. $\frac{d\hat{\sigma}_x}{dt} = \frac{e}{m}\left[\hat{\vec{\sigma}} \times \vec{H}\right]_x$.

4.II. $\hbar^2/4$.

4.I2. I/30 $S(S+1)\left[2S(S+1)+1\right]$.

4.I4. $E_I = E_2 = E_3 = 7/4\, J$; $E_4 = -3/4\, J$;

$\Psi_1 = \chi_+(1)\chi_+(2)$; $\Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\chi_+(1)\chi_-(2) + \chi_-(1)\chi_+(2)\right]$; $\Psi_3 = \chi_-(1)\chi_-(2)$; $\Psi_4 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\chi_+(1)\chi_-(2) - \chi_-(1)\chi_+(2)\right]$, где $\chi_+ = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$, $\chi_- = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$.

4.I7. $\langle l_z\rangle = m\cos\alpha$.

$\langle(\Delta l_z)^2\rangle = \frac{1}{2}\left[l(l+1) - m^2\right]\sin^2\alpha$.

4.I8. Поскольку $\hat{\vec{l}}_p = -i\left[\vec{p} \times \frac{\partial}{\partial\vec{p}}\right]$, то $\Psi_{lm}(\vec{p}) = Y_{lm}(\vartheta,\alpha)$,

где ϑ, α - полярный и азимутальный углы вектора $\vec{p}$.

5.2. а) $\Psi(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$, $\Psi(\vec{p}) = \delta(\vec{p})$;

б) $\Psi(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$, $\Psi(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left[i(\vec{r}_0\vec{p})/\hbar\right]$.

5.7. $w = \int_{z_1}^{z_2}\int_{p_1}^{p_2}\int_{-\infty}^{+\infty} |F(x,p_y,z)|^2 dx\, dp_y\, dz$, $F(x,p_y,z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int e^{-\frac{i}{\hbar}p_y y}\Psi(\vec{r})dy$.

5.8. $\exp\left[-\frac{i}{\hbar}m(\vec{v}\vec{r}) + i\frac{(\vec{v}\vec{p})}{\hbar}t\right]$.

5.9. Пусть $\hat{a} = \hat{A} + i\hat{B}$, $\hat{a}^+ = \hat{A} - i\hat{B}$, тогда $[\hat{A},\hat{B}] = i/2$.

5.I0. $\hat{a} = \alpha\hat{x} + \beta\hat{p}_x$, выбор α, β - неоднозначен, например, можно $\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}L}$, $\beta = \frac{iL}{\sqrt{2}\hbar}$.

$\Psi_0(x) = (\pi L^2)^{-\frac{1}{4}} \exp\{-x^2/2L^2\}$.

5.II. Бозоны: с. ф. $\hat{a}$ — $\Psi = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\exp(-|\alpha|^2/2)\cdot|n\rangle$,

α - любое комплексное число. Распределение по числу частиц в этом состоянии есть

$w_n = \frac{|\alpha|^{2n} e^{-|\alpha|^2}}{n!}$ - распределение Пуассона.

5.I2. Указание: показать, что $\hat{n}^2 = \hat{n}$.

5.I3. Для ферми-операторов преобразование не является унитарным, для бозе-операторов - унитарно.

$\hat{U} = \exp(\alpha^*\hat{a} - \alpha\hat{a}^+)$

Распределение $w_n = \frac{|\alpha|^{2n}}{n!}e^{-|\alpha|^2}$, α - с. зн. $\hat{a}$.

5.14. Для бозе-операторов

$$w_n = \frac{(n-1)!!}{n!!}\left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^n \cdot \frac{1}{|\alpha|}$$ при n – четном и $w_n = 0$,

если n – нечетно.

5.15. Для ферми-операторов новые частицы-дырки.

5.16. $$\hat{\mathcal H} = \sum_{\vec p,\sigma}\frac{\vec p^{\,2}}{2m}\hat n_{\vec p\sigma}; \quad \vec P = \sum_{\vec p\sigma}\vec p\,\hat n_{\vec p\sigma};$$

$$\vec R = \sum_\sigma \int \hat\Psi^+(\vec r,\sigma)\,\vec r\,\hat\Psi(\vec r,\sigma)\,d^3r.$$

5.17. $$\hat n(\vec r) = \sum_i \delta(\vec r - \vec r_i) = \sum_\sigma \hat\Psi^+(\vec r,\sigma)\hat\Psi(\vec r,\sigma);$$

$$\hat N(V) = \sum_\sigma \int_V \hat\Psi^+(\vec r,\sigma)\hat\Psi(\vec r,\sigma)\,d^3r.$$

5.18. $$\hat n(\vec r_1)\cdot\hat n(\vec r_2) = \sum_{\sigma_1\sigma_2}\hat\Psi^+(\vec r_1\sigma_1)\hat\Psi(\vec r_1\sigma_1)\hat\Psi^+(\vec r_2\sigma_2)\hat\Psi(\vec r_2\sigma_2).$$

6.1. $$R(E) = (\sqrt{E} - \sqrt{E-U_0})^2(\sqrt{E}+\sqrt{E-U_0})^{-2}, \quad \operatorname{tg}\delta = \frac{\sqrt{E(U_0-E)}}{E-U_0/2};$$

6.2. $$D(E) = \begin{cases} \dfrac{4E(E-U_0)}{4E(E-U_0) + U_0^2\sin^2\sqrt{2(E-U_0)a^2\mu/\hbar^2}}, & E > U_0; \\[2ex] \dfrac{4E(U_0-E)}{4E(U_0-E) + U_0^2\operatorname{sh}^2\sqrt{2(U_0-E)a^2\mu/\hbar^2}}, & E < U_0. \end{cases}$$

6.3. $$D(E) = \frac{k^2\hbar^4}{k^2\hbar^4 + \mu^2U_0^2}, \quad k = \sqrt{2\mu E/\hbar^2}.$$

6.4. При $E<0$ имеется одно состояние дискретного спектра $E_0 = -\mu U_0^2/2\hbar^2$; при $E>0$ – непрерывный спектр.

6.5. $$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar F}}\exp\left[+i(Ep - p^3/2\mu)/\hbar F\right].$$

6.6. $$\left(\frac{p^2}{2\mu} - \frac{\mu\omega^2\hbar^2}{2}\frac{d^2}{dp^2}\right)\Phi_n = E_n\Phi_n,$$

$$\Phi_n(p) = \frac{\exp(-p^2/2\mu\hbar\omega)}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi\mu\hbar\omega}}}H_n\left(\frac{p}{\sqrt{\mu\hbar\omega}}\right).$$

6.8. $$\hat{\mathcal H} = \hbar\omega\left(\hat a^+\hat a + \tfrac12\right).$$

6.9. $E_n = -U_0\left[1-(n+\tfrac12)\sqrt{\hbar^2/2\mu a^2U_0}\right]^2$, n = 0, 1, 2,...

$n < \sqrt{2\mu a^2U_0/\hbar^2} - \frac12$ – условие на глубину ямы U_0.

6.10. Энергия частицы определяется уравнением

$$\operatorname{ch}\lambda b\cdot\cos\varkappa a + \frac{\lambda^2-\varkappa^2}{2\lambda\varkappa}\operatorname{sh}\lambda b\cdot\sin\varkappa a = \cos kl$$, где

$\varkappa^2 = 2\mu E/\hbar^2$, $\lambda^2 = 2\mu(V_0-E)/\hbar^2$, $l = a+b$.

6.11. Энергия частицы определяется уравнением

$$f(E) = \cos\varkappa l + p\frac{\sin\varkappa l}{\varkappa l} = \cos kl, \quad p = \lim_{V_0\to\infty,\, b\to 0}\frac{\lambda^2 ab}{2},$$

$E = E_0 + Fk^2$ – зависимость энергии частицы от волнового вектора k вблизи границы разрешенных полос энергии (E_0 и F – некоторые константы).

6.12. Уровни энергии в запрещенной зоне определяются уравнением

$$\frac{q^2}{2p} - \sqrt{q^2-\xi^2} = \xi\operatorname{ctg}\xi, \quad \xi = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}\,l, \quad q = l\sqrt{\frac{2\mu W_0}{\hbar^2}}.$$

6.13. Представив $\hat{\mathcal H} = \hat h_1 = \hat a_1^+\hat a_1 + \Lambda_1$, $\hat{\mathcal H} - \hat h_2 = \hat a_2^+\hat a_2 + \Lambda_2 = \hat a_1\hat a_1^+ + \Lambda_1$ и т.д., получим

а) $$E_n = -U_0\xi^2\left(n+\frac12 - \frac12\sqrt{1+4\xi^2}\right)^2,$$

$\xi^2 = \frac{1}{U_0}\left(\frac{\hbar}{a\sqrt2\,m}\right)^2$, причем $n \le -\frac12 + \frac12\sqrt{1+4\xi^2}$;

б) $E_n = U_0\,\xi^2\left(n+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\sqrt{1+4\xi^{-2}}\right)^2$, $\xi = \frac{1}{U_0}\left(\frac{\pi\hbar}{a\sqrt{2}m}\right)^2$.

6.14. $E_{n_1 n_2} = \hbar\omega_1\left(n_1+\frac{1}{2}\right)+\hbar\omega_2\left(n_2+\frac{1}{2}\right)$;

$\Psi_{n_1 n_2} = \Psi^{осц}_{n_1}(x)\,\Psi^{осц}_{n_2}(y)$.

6.15. $\Psi(\rho,\varphi) = C\,J_m(\varkappa_{n_\rho|m|}\,\rho)\,e^{im\varphi}$,

$\varkappa_{n_\rho|m|} = \sqrt{2\mu E_{n_\rho|m|}/\hbar^2}$, J_m – функция Бесселя.

$E_{n_\rho|m|} = \frac{\hbar^2\alpha^2_{n_\rho+1,\,m}}{2\mu a^2}$, $J_m(\alpha_{km}) = 0$.

6.16. а) $E_{|m|} = (\hbar^2/2I)\,m^2$,

$$\Psi_m(\varphi) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos m\varphi, \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin m\varphi, \end{cases}$$

$m = 0, \pm 1, \ldots$

б) $E_l = (\hbar^2/2I)\,l(l+1)$, $\Psi_{lm}(\vartheta,\alpha) = Y_{lm}(\vartheta,\alpha)$,

$m=0, \pm 1, \ldots$ $l=0, 1, \ldots$

6.17. $E_n = -d\mathcal{E}_0 + \hbar\sqrt{d\mathcal{E}_0 I^{-1}}\left(n+\frac{1}{2}\right)$,

$$\Psi_n(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2^n\sqrt{\pi}\,\varphi_0\, n!}}\exp\left(-\frac{\varphi^2}{2\varphi_0^2}\right)H_n\left(\frac{\varphi}{\varphi_0}\right),\quad \varphi_0 = \left(\frac{\hbar^2}{I d\mathcal{E}_0}\right)^{1/4}.$$

Указание: разложить потенциальную энергию в ряд по φ, поскольку в сильном электрическом поле в.ф. нижних уровней локализованы в области малых φ.

6.18. $E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) - \frac{e^2\mathcal{E}^2}{2\mu\omega^2}$, $\Psi_n = \Psi_n^{осц}\left(x - \frac{e\mathcal{E}_0}{\mu\omega^2}\right)$.

Указание: в уравнении Шредингера сделать замену

$z = x - e\mathcal{E}_0/\mu\omega^2$.

6.19. См. [2], § 33.

6.20. $\Psi_{nlm}(r,\vartheta,\alpha) = e^{im\alpha}P_{lm}(\cos\vartheta)\,f_{nl}(r)$, $f_{nl}(r) = \frac{\chi_{nl}(r)}{\sqrt{r}}$,

$\chi_{nl}(r) = J_{\pm(l+\frac{1}{2})}(k_{nl}r)$,

$k^2_{nl} = \frac{2\mu E_{nl}}{\hbar^2}$, $J_{\pm(l+\frac{1}{2})}(x)$ – функция Бесселя полуцелого порядка.

6.21. $R(r) = \frac{C_1}{r}J_q(cy)$, $q^2 = -\frac{8\mu E a^2}{\hbar^2}$ $(E<0)$,

$c^2 = \frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2}$, $y = e^{-\frac{r}{2a}}$. Уровни энергии определяются из условия $J_q(cy)$ =0. Условие существования хотя бы одного дискретного уровня (E < 0); $c>2{,}4$, т.е. $a^2V_0 > \frac{\hbar^2}{2\mu}(2{,}4)^2$.

6.22. $R(r) = \frac{const}{r}$.

6.24. $\varphi(r) = e\left(\frac{1}{a}+\frac{1}{r}\right)\exp\left(-\frac{2r}{a}\right)$.

6.25. $\langle \vec{E}(\vec{R})\rangle \simeq \frac{2e\vec{R}}{a^2R}\exp\left(-\frac{2R}{a}\right)$.

6.26. $j_r = 0$, $j_\vartheta = 0$, $j_\alpha = m\frac{e\hbar}{\mu r\sin\vartheta}|\Psi_{nlm}|^2$,

магнитный момент $\vec{M} = \frac{e\hbar}{2\mu c}m\vec{e}_z = -\mu_B m\vec{e}_z$;

магнитное поле на ядре $\vec{H} = -\vec{e}_z\frac{e\hbar}{\mu c}m\langle r^{-3}\rangle$,

$\langle r^{-3}\rangle = \left(\frac{\mu e^2}{\hbar^2}\right)^3\frac{1}{n^3 l(l+\frac{1}{2})(l+1)}$.

В состоянии 2p(m =1) H $\sim 10^4$ гаусс.

6.27. см. [2], § 36.

6.29. $\langle r^{-1}\rangle = \frac{1}{n^2 a}$.

6.30. Указание: умножить уравнение для радиальной функции на

$$r^{\kappa+1}\frac{dR}{dr}-\frac{\kappa+1}{2}r^{\kappa}R.$$

6.31. $E_{nl}=-\mu\beta^2\left/2\hbar^2\left[n+\mu\alpha/\hbar^2\left(l+\frac{1}{2}\right)\right]\right\}^{-2}, \ \beta>0.$

6.32. $E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{3}{2}\right);\ g=(n+1)(n+2)/2\ ;\ l=n,\ n-2,\dots .$

6.33. Т.к. произведение квадрата модуля волновой функции состояния, характеризующегося определенной четностью, и дипольного момента системы частиц $\vec{d}=\sum_i q_i\vec{r}_i$ нечетно, интеграл от него по всему объему равен нулю.

7.I. а) $E_1^{(2)}=\frac{|a|^2}{E_1-E_3},\ E_2^{(2)}=\frac{|b|^2}{E_2-E_3},\ E_3^{(2)}=\frac{|a|^2}{E_3-E_1}+\frac{|b|^2}{E_3-E_2}.$

б) $E_s^{(2)}=E_2+|b|+\frac{|a|^2}{2}\frac{1}{E_2-E_1+|b|};$

$$E_a^{(2)}=E_2-|b|+\frac{|a|^2}{2}\frac{1}{E_2-E_1+|b|}.$$

7.2. $E^{(1)}=\frac{\Delta+V_{11}+V_{22}}{2}\pm\frac{1}{2}\sqrt{(\Delta+V_{22}-V_{11})^2+4|V_{12}|^2}.$

7.3. $E_n^{(2)}=\sum_{\kappa}{}'|V_{\kappa n}|^2/(E_n^0-E_\kappa^0),\ C_{n'n}^{(1)}=\frac{1}{V_{nn}-V_{n'n'}}\cdot$

$$\cdot\sum_{\kappa}{}'\frac{V_{n'\kappa}V_{\kappa n}}{E_n^0-E_\kappa^0},$$

Ψ_n^0 -правильные функции нулевого приближения.

7.4. $E_n^{(1)}=\left(\frac{\hbar}{\mu\omega}\right)^2\left[\beta\frac{6n^2+6n+3}{4}-\frac{15\alpha^2}{4\mu\omega^2}\left(n^2+n+\frac{11}{30}\right)\right].$

7.5. $E_n-\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\left[1+\frac{2\varepsilon}{\mu\omega^2}-\frac{(2\varepsilon)^2}{8\mu^2\omega^4}+\frac{(2\varepsilon)^3}{16\mu^3\omega^6}\right];$

$$E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\sqrt{1+\frac{2\varepsilon}{\mu\omega^2}}$$ - точное решение.

7.6. $E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)-e^2\mathcal{E}^2/2\mu\omega^2.$

7.7. $E_0=-\frac{d^2\mathcal{E}_0^2 J}{\hbar^2}$, поляризуемость $\alpha_0=\frac{2Jd^2}{\hbar^2}$, т.к. энергия индуцированного диполя в поле $\mathcal{E}_0$ равна $-\alpha\mathcal{E}_0^2/2$.

7.8. $E_m^{(1)}=0,\ E_m^{(2)}=\frac{Jd^2\mathcal{E}^2}{\hbar^2(4m^2-1)}$ $(m\neq\pm 1)$;

$$E_{1,1}^{(2)}=-\frac{Jd^2\mathcal{E}^2}{6\hbar^2},\ E_{1,2}^{(2)}=\frac{5Jd^2\mathcal{E}^2}{6\hbar^2}.$$

Правильные линейные комбинации:

$$\Psi_{m,1}^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos m\varphi,\ \Psi_{m,2}^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin m\varphi.$$

7.9. $E_{00}^{(2)}=-\frac{Jd^2\mathcal{E}^2}{3\hbar^2},\quad \alpha_0=\frac{2Jd^2}{3\hbar^2}.$

7.I0. Используя рекуррентные соотношения, находим

$$V_{l'm',lm}=-d\mathcal{E}\cdot\delta_{m'm}\cdot\begin{cases}a_{lm}, & l'=l+1\\ b_{lm} & l'=l-1\\ 0, & \text{в остальных слу-}\end{cases}$$

чаях, отсюда $E_l^{(1)}=0$.

$$E_{lm}^{(2)}=\sum_{l'}{}'\frac{|V_{l'm,lm}|^2}{E_l^0-E_{l'}^0}=\frac{Jd^2\mathcal{E}^2[2l^3+3l^2+l-m^2(l^2+6l+3)]}{\hbar^2 l(l+1)(2l-1)(2l+1)(2l+3)}.$$

7.II. $E_1^{(1)}=\pm\frac{a}{2}\frac{\hbar}{\mu\omega};$ точное решение

$$E_{n_1,n_2}=\hbar\left(n_1+\frac{1}{2}\right)\sqrt{\frac{\omega_1^2+\omega_2^2}{2}+\frac{\omega_2^2-\omega_1^2}{4}\cos 2\beta+\frac{a}{\mu}\sin 2\beta}+$$

$$+\hbar\left(n_2+\frac{1}{2}\right)\sqrt{\frac{\omega_1^2+\omega_2^2}{2}-\frac{\omega_2^2-\omega_1^2}{4}\cos 2\beta-\frac{a}{\mu}\sin 2\beta},$$ где

$$\operatorname{tg}2\beta=2a/\mu(\omega_2^2-\omega_1^2).$$

7.I2. $E_n^{(1)}=\frac{e^2}{\lambda}\left\{1-\frac{1}{4\xi}\left[3(n-1)^2+6(n-1)+3\right]\right\},\ \xi=\frac{e^2\lambda\mu}{\hbar^2}\gg n^2.$

7.13. $E_1^{(1)} = 24 e\beta a^2, \quad \Psi_1 = |210\rangle, \quad E_{2,3}^{(1)} = -12 e\beta a^2;$

$$\Psi_2 = \sin\alpha\,|211\rangle + e^{i\beta}\cos\alpha\,|21-1\rangle,$$

$$\Psi_3 = -\cos\alpha\,|211\rangle + e^{i\beta}\sin\alpha\,|21-1\rangle,$$

α, β - произвольны.

7.14. $E_1 = \frac{1}{2}D, \quad \Psi_{20}, \ \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{22} + \Psi_{2-2});$

$$E_2 = -\frac{1}{3}D, \quad \Psi_{2\pm1}, \ \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{22} - \Psi_{2-2}).$$

7.16. $E_{1s}^{(2)} = -\dfrac{|\langle 1s|V|2p_z\rangle|^2}{E^0_{2p} - E^0_{1s}} = -\dfrac{2^{22}}{3^{11}} a^3 \mathcal{E}^2.$

7.18. $\hat{V}_{вз.} = Ze\left(\dfrac{e}{R} - \dfrac{e}{|\vec{R} - \vec{r}|}\right) \simeq \dfrac{Ze(\vec{d}\vec{R})}{R^3},$

$$E^{(1)}_{вз} = 0, \quad E^{(2)}_{вз.} = -\frac{(Ze)^2}{R^4}\left|\langle 1s|\frac{(\vec{d}\vec{R})}{R}|2p\rangle\right|^2 = -\frac{9}{4}\frac{(Ze)^2 a_0^3}{R^4}.$$

7.19. Энергия электростатического взаимодействия на больших расстояниях между атомами R равна:

$$V_{вз.} = \frac{(\vec{d}_1\vec{d}_2)}{R^3} - 3\frac{(\vec{d}_1\vec{R})(\vec{d}_2\vec{R})}{R^5}.$$

7.20. Взаимодействие возникает во 2-ом порядке теории возмущений по диполь-дипольному взаимодействию

$$V_{вз}(R) = -\frac{d_1^2 d_2^2}{3R^6(B_1 + B_2)},$$

где $E_K = E_0 + BK(K+1)$ - энергия возбужденного состояния изолированной молекулы, отличающегося от основного состояния лишь квантовыми числами К и М, характеризующими вращение молекулы.

7.21. Указание: использовать адиабатическое приближение. "Быстрой" подсистемой является движение вдоль оси X в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной $a(y) = 2a\sqrt{1 - y^2/b^2}$. Движение вдоль оси у определяется потенциалом

$$V(y) = \begin{cases} \infty, \ \text{при} \ |y| > b \\ \hbar^2\pi^2(n_1+1)^2/8\mu a^2(1 - y^2/b^2) \quad \text{при} \ |y| < b. \end{cases}$$

Для нижней части спектра $V(y)$ можно разложить в ряд

$$E_{n_1 n_2} = \frac{\hbar^2\pi^2(n_1+1)^2}{8\mu a^2} + \frac{\hbar^2\pi^2(n_1+1)}{2\mu ab}\left(n_2 + \frac{1}{2}\right),$$

$$\Psi_{n_1 n_2}(x,y) = \left(2^{n_2}\sqrt{\pi}\, y_0\, n_2!\right)^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{y^2}{2y_0^2}\right) H_{n_2}\left(\frac{y}{y_0}\right)\sqrt{\frac{2}{a(y)}}\,\cdot$$

$$\cdot \sin\left\{\frac{\pi(n_1+1)\left(x + \frac{a(y)}{2}\right)}{a(y)}\right\}, \quad y_0 = \sqrt{2ab/\pi(n_1+1)}.$$

7.22.

$$\Psi_{n_1 n_2 n_3} = \Psi_{n_1}(z; x, y)\, \Psi^{осц}_{n_2}(x) \cdot \Psi^{осц}_{n_3}(y);$$

$$\Psi_{n_1}(z; x, y) = \sqrt{\frac{2}{b(\rho)}} \sin\frac{\pi(n_1+1)[z + b(\rho)/2]}{b(\rho)};$$

$$b(\rho) = 2b\sqrt{1 - \rho^2/a^2}, \quad \rho = \sqrt{x^2 + y^2}.$$

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\hbar^2\pi^2(n_1+1)^2}{8\mu b^2} + \frac{\hbar^2\pi^2(n_1+1)(n_2+n_3+1)}{2\mu ab};$$

$$n_1, n_2, n_3 = 0, 1, 2, \ldots; \ (n_2 + n_3 + 1) \ll \frac{a}{b}(n_1+1).$$

7.23. Указание: "медленной" подсистемой **считать** движение вдоль оси Z. Разложить эффективную потенциальную энергию в ряд вблизи точки минимума.

$$E_{n_1 m n_2} = \frac{\hbar^2 \alpha^2_{n_1+1, m}}{2\mu a^2} + \frac{\hbar^2 \alpha_{n_1+1, m}}{\mu ab}\left(n_2 + \frac{1}{2}\right).$$

7.24. Для "медленной" подсистемы

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dy^2}+\hbar\omega\left(n_1+\frac{1}{2}\right)+\frac{K-\alpha^2K^{-1}}{2}y^2\right]\Phi_{n_1n_2}=E_{n_1n_2}\Phi_{n_1n_2};$$

$$E_{n_1n_2}=\hbar\omega\left(n_1+\frac{1}{2}\right)+\hbar\omega\sqrt{\frac{m}{M}\left(1-\frac{\alpha^2}{K^2}\right)}\left(n_2+\frac{1}{2}\right).$$

Для получения точного решения сделать замену $z=y\sqrt{\frac{M}{m}}$ и совершить поворот на угол φ_0, где

$$\mathrm{tg}\,2\varphi_0=-2\alpha\sqrt{\frac{m}{M}}\Big/K\left(1-\frac{m}{M}\right).$$

$$E_{n_1n_2}=\frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}}\left[\sqrt{1+\frac{m}{M}+\sqrt{\left(1-\frac{m}{M}\right)^2+\frac{4m\alpha^2}{MK^2}}}\left(n_1+\frac{1}{2}\right)+\right.$$

$$\left.+\sqrt{1+\frac{m}{M}-\sqrt{\left(1-\frac{m}{M}\right)^2+\frac{4m\alpha^2}{MK^2}}}\left(n_2+\frac{1}{2}\right)\right].$$

7.25. Для "быстрой" частицы массы m и X_2

$$\Psi_n(X_1,X_2)=\sqrt{\frac{2}{a-X_2}}\sin\frac{\pi(n_1+1)(X_1-X_2)}{a-X_2},\quad E_{n_1}(X_2)=\frac{\hbar^2\pi^2(n_1+1)^2}{2m(a-X_2)}.$$

Разлагая $E_{n_1}(X_2)$ в ряд, находим

$$E_{n_1n_2}=\frac{\hbar^2\pi^2(n_1+1)^2}{2ma^2}+\left[\frac{\hbar^2\pi^4(n_1+1)^4}{2m^2Ma^6}\right]^{1/3}\alpha_{n_2+1},\quad n_1,n_2=0,1,\ldots$$

$(-\alpha_{n_2+1})$ (n_2 =0,I,2) - последовательность корней функции Эйри. Условие применимости разложения

$$\alpha_{n_2+1}\ll\pi(n_1+1)^{2/3}\left(\frac{M}{m}\right)^{1/3}.$$

7.27. $\hbar\omega\frac{\sqrt{2}}{2};\quad \hbar\omega\frac{1}{2}\sqrt{\frac{6}{5}};\quad \hbar\omega\frac{1}{2}\cdot\frac{5}{9}\sqrt{\frac{11}{3}}.$

7.28. $E_0=\frac{\hbar\omega}{2}+\frac{3\hbar^2}{4\mu^2\omega^2}\varepsilon-\frac{9\hbar^3}{4\mu^4\omega^5}\varepsilon^2.$

7.29. а) $V_{вз}(R)=-\frac{4e^2a^5}{R^6};$

б) $V_{вз}(R)=-\frac{6e^2a^5}{R^6}.$

7.3I. $W_a=E_1+\frac{(\beta_a/\alpha_a)^2}{1-(\beta_a/\alpha_a)^2}(E_1-E_2),$

$$W_в=E_2-\frac{(\alpha_в/\beta_в)^2}{1-(\alpha_в/\beta_в)^2}(E_1-E_2),$$

$$\Psi_a=N^{-\frac{1}{2}}(\varphi_2+\gamma\varphi_1),\quad \gamma=\alpha_в/\beta_в,$$

$$\Psi_в=N^{-\frac{1}{2}}(\varphi_1-\lambda\varphi_2)\quad \lambda=-\beta_a/\alpha_a.$$

7.32. $\hat{\mathcal{H}}_2=-i\left[\hat{S},\hat{\mathcal{H}}_0\right]_{\text{недиагон.}}$

8.I. а) $D\approx\exp\left[-\frac{\pi a}{\hbar}\sqrt{\frac{2\mu}{U_0}}(U_0-E)\right];$

б) $D\approx\exp\left[-\frac{4a\sqrt{2\mu}}{3U_0\hbar}(U_0-E)^{3/2}\right];$

в) $D\approx\exp\left[-\frac{4a}{\hbar}\sqrt{2\mu E}\left(\sqrt{\frac{U_0}{E}-1}-\mathrm{arctg}\sqrt{\frac{U_0}{E}-1}\right)\right];$

г) $D\approx\exp\left[-\frac{2\pi a}{\hbar}\sqrt{2\mu}\left(\sqrt{U_0}-\sqrt{E}\right)\right]$

при условиях $\frac{2\pi a}{\hbar}\sqrt{2\mu}\left(\sqrt{U_0}-\sqrt{E}\right)\gg1,\ \sqrt{E}\gg\sqrt{\hbar^2/\mu a^2};$

д) $D\approx\left(E/16U_0\right)^{\frac{2}{\hbar}a\sqrt{2\mu U_0}}\exp\left(\frac{4}{\hbar}a\sqrt{2\mu U_0}\right)$

при условиях $\frac{a}{\hbar}\sqrt{2\mu U_0}\gg1,\ E\ll\frac{\hbar}{a}\sqrt{\frac{U_0}{\mu}}.$

8.2. $D(E)=\frac{4\sqrt{E(U_0-E)}}{U_0}\exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\int_a^в|p|\,dx\right\}.$

8.3. $E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right).$

8.4. а) $E_n=V_0\left\{1-\left[1-\frac{\hbar\omega_0}{2V_0}\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]^2\right\},\quad \omega_0=\sqrt{2V_0/\mu a^2},$

$\hbar\omega_0\ll2V_0;$

б) E определяется из уравнения

$$\frac{\sqrt{-2\mu E}}{2\hbar}a\left(-1+\frac{2U_0}{E}-2\sqrt{-\frac{U_0}{E}-1}\right)=n+\frac{1}{2},\ -U_0<E<0;$$

в) E определяется из соотношений

$$\frac{\pi\hbar}{2a\sqrt{2\mu U_0}}\left(n+\frac{1}{2}\right)=I(E);$$

$$I(E)=\frac{E}{U_0\sqrt{1+\sqrt{E/U_0}}}\left\{\frac{\pi}{2}-\mathrm{arctg}\left[\left(\frac{U_0}{E}\right)^{1/4}\right]\right\},\quad E>U_0;$$

$$I(E) = -\frac{E}{2U_0\sqrt{1-\sqrt{E/U_0}}}\,\ln\frac{\sqrt{1+\sqrt{U_0/E}}-\sqrt{1-\sqrt{E/U_0}}}{\sqrt{1-\sqrt{E/U_0}}+\sqrt{1+\sqrt{U_0/E}}}$$

при $E < U_0$;

г) $E_n = \frac{4\hbar}{a}\sqrt{\frac{U_0}{2\mu}}\left(n+\frac{1}{2}\right)$, $n = 0, 1, \ldots$

8.6. $E_{n_r l} = -\frac{\mu\alpha^2}{2\hbar^2(n_r+l+1)}$, $\alpha = Ze^2$.

8.7. $E_{n_r l} = \hbar\omega\left(2n_r + l + \frac{3}{2}\right)$.

9.1. а) $W^{(1)}_{kn} = \frac{e^2}{2\mu^2\omega^2}\left(\frac{2\tau\mathcal{E}_0}{1+\omega^2\tau^2}\right)^2\left[(n+1)\delta_{k,n+1} + n\,\delta_{k,n-1}\right]$;

б) $W^{(1)}_{kn} = \frac{e^2\pi\tau^2\mathcal{E}_0^2}{2\mu^2\omega^2}\exp\left(-\frac{\omega^2\tau^2}{2}\right)\left[(n+1)\delta_{k,n+1} + n\,\delta_{k,n-1}\right]$.

9.2. а) $W^{(1)}_{m\pm1,m} = \frac{d^2}{4\hbar^2}\left(\frac{2\tau\mathcal{E}_0}{1+\omega_\pm^2\tau^2}\right)^2$, $\omega_\pm = \pm\frac{(2m\pm1)\hbar}{2I}$;

б) $W^{(1)}_{m\pm1,m} = \frac{\pi d^2}{4\hbar^2}\tau^2\mathcal{E}_0^2\exp\left(-\frac{\omega_\pm^2\tau^2}{2}\right)$.

9.3. $W^{(1)}_{mn} = \frac{|(V_0)_{mn}|^2}{\hbar^2\omega_{mn}^2}\exp\left(-\frac{2\omega_{mn}}{\alpha}\right)$, $E_m > E_n$.

При $\alpha\to\infty$ $V(t)$ принимает вид "ступеньки" и

$$W^{(1)}_{mn} = \frac{|(V_0)_{mn}|^2}{\hbar^2\omega_{mn}^2}.$$

При $\alpha\to 0$ $V(t)$-плавная функция и $W_{mn}\simeq 0$.

9.4. $W_{21} = \sin^2 2\alpha\cdot\sin^2\frac{\varepsilon_2-\varepsilon_1}{2\hbar}t$,

$W_{11} = 1-\sin^2 2\alpha\cdot\cos^2\frac{\varepsilon_2-\varepsilon_1}{2\hbar}t$, $\operatorname{tg}\alpha = -\frac{V_{12}}{E_1+V_{11}-\varepsilon_1}$,

$\varepsilon_{1,2} = \frac{1}{2}(E_1+E_2+V_{11}+V_{22}) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(E_1-E_2+V_{11}-V_{22})^2+4|V_{12}|^2}$,

$E_1 = \hbar\omega_1$, $E_2 = \hbar\omega_2$;

Период осцилляций $T = \frac{\hbar}{\sqrt{(E_1-E_2+V_{11}-V_{22})^2+4|V_{12}|^2}}$.

9.5. На масштабе времени $t > \frac{1}{\omega_0}$ $W_{21} = \frac{|V_{21}|^2}{4\hbar^2\Omega^2}\sin^2\Omega t$,

где $\Omega = \frac{1}{2}\sqrt{(\omega-\omega_0)^2+|V_{12}|^2/\hbar^2}$.

9.6. $W^{(1)}_{n0} = \frac{e^2\mathcal{E}_0^2}{2\hbar\mu\omega^3}\delta_{n,1}$.

9.8. $W^{(1)}_{2S,1S} = 0$; $W^{(1)}_{2P_z,1S} = \left(\frac{2\tau}{1+\omega_{21}^2\tau^2}\right)^2 e^2\mathcal{E}^2a^2\frac{2^{15}}{3^{10}}$, $\hbar\omega_{21} = \frac{3e^2}{8a}$.

9.10. Удобно вычислять $F_{\nu0}$ в сферической системе координат с полярной осью вдоль вектора $\vec{\kappa} = \vec{p}/\hbar$

$$F_{\nu0} = \frac{4\sqrt{2}}{\pi}\,\frac{e\mathcal{E}_0\cos\theta\,\kappa\,a^{7/2}}{(1+\kappa^2a^2)^3},$$

где θ –полярный угол $\vec{\mathcal{E}}_0$. Вероятность ионизации в единицу времени, при которой направление импульса вылетающего электрона заключено внутри телесного угла $d\Omega_{\vec{\kappa}}$, равна

$$dW_{\vec{\kappa}} = \frac{64}{\pi}\,\frac{a^3\mathcal{E}_0^2}{\hbar}\left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^6\left(\frac{\omega}{\omega_0}-1\right)^{3/2}\cos\theta\,d\Omega_{\vec{\kappa}},$$

где $\hbar\omega_0 = -E_0$. Интегрируя по всем углам вылета, получаем полную вероятность ионизации атома в единицу времени

$$W = \frac{256}{3}\,\frac{a^3\mathcal{E}_0^2}{\hbar}\left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^6\left(\frac{\omega}{\omega_0}-1\right)^{3/2}.$$

Заметим, что

$$\int e^{-\frac{i(\vec{p}\vec{r})}{\hbar}}\,\hat{\vec{p}}\,\frac{e^{-\frac{r}{a}}}{r}\,d^3r = \frac{4\pi a^2\vec{p}}{1+p^2a^2/\hbar^2}.$$

9.11. В пренебрежении эффектами запаздывания

$$\beta_n = \frac{1}{\hbar}\sum_k\left|(\vec{d}\,\vec{n}_0)_{kn}\right|^2\frac{2\omega_{kn}}{\omega_{kn}^2-\omega^2},\quad \vec{n}_0 = \frac{\vec{\mathcal{E}}_0}{\mathcal{E}_0}.$$

9.12. Волновая функция атома перед "встряхиванием" имеет вид:

$\Psi = \Psi(\vec{R})\Psi_0(\vec{r}_i)$, где $\vec{R}$ –координаты центра масс. Волновая функция после "встряхивания"

$$\Psi = e^{i\frac{M(\vec{R}\vec{V})}{\hbar}}\Psi(\vec{R})\,e^{-i\frac{m\vec{V}}{\hbar}\sum_i\vec{r}_i}\Psi_0(\vec{r}_1,\ldots).$$

$$W_{n0}=\left|\int \Psi_n^{*}\, e^{-\frac{imV}{\hbar}\sum_i \vec r_i}\, \Psi_0(\vec r_1,\ldots)\, dV\right|^2.$$

9.13. Вероятность атому остаться в основном состоянии равна

$$W_0=\left|\frac{\int e^{-\frac{2r}{a}}\, e^{-i(\vec q\vec r)}\, dV}{\pi a^3(1+q^2a^2/4)^2}\right|^2,\quad q=m\vec P/\hbar M,$$

M - масса ядра.

9.14.

$$a_{kn}^{(2)}(t)=-\frac{1}{\hbar^2}\sum_m \int_{-\infty}^{t} V_{km}(t')e^{i\omega_{km}t'}dt' \int_{-\infty}^{t'} V_{mn}(t'')e^{i\omega_{mn}t''}dt''.$$

9.15. Интегрирование по частям при $t>0$ дает:

а) $$a_{kn}^{(1)}(t)=\frac{1}{\hbar\omega_{kn}}(V_0)_{kn}-\frac{1}{\hbar\omega_{kn}}(V_0)_{kn}\, e^{i\omega_{kn}t},$$

$$\Psi=\left(\psi_n^{(0)}-\sum_{km}\frac{(V_0)_{kn}}{\hbar\omega_{kn}}\psi_k^{(0)}\right)e^{-i\omega_n t}+\sum_k{}'\frac{(V_0)_{kn}}{\hbar\omega_{kn}}\psi_k^{(0)}e^{-i\omega_k t};$$

Вероятность перехода $W_{kn}^{(1)}=\dfrac{1}{\hbar^2\omega_{kn}^2}\left|(V_0)_{kn}\right|^2.$

б) $W_{kn}^{(1)}=\dfrac{1}{\hbar^2\omega_{kn}^2}\left|(V_0)_{kn}\right|^2.$

9.16. Пусть ψ_n и $\tilde\psi_n$ - собственные функции $\hat H_0$ и $\hat H_0+\hat V$ соответственно. При $t>0$ волновая функция системы есть

$$\Psi(t)=\sum_k a_{kn}\tilde\psi_k\, e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}},\quad a_{kn}=\int \tilde\psi_k^{*}\psi_n\, dV.$$

Здесь учтено, что тотчас после включения $\hat V$ состояние системы не успевает измениться. $W_{kn}=|a_{kn}|^2.$

9.17. $$W_{kn}=\left|\int \psi_k^{(0)*}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat V_0\tau}\, \psi_n^{(0)}\, d\tau\right|^2.$$

Указание: решить временное уравнение Шредингера, рассматривая $\hat V_0\,\delta(t)$ как предельный переход при $\tau\to 0$ возмущения $\hat V(t,\tau)=\hat V_0\,\frac{f(t,\tau)}{\tau}$, где $f(t,y)=0$ при $|y|\geq 1$ и $\int_{-1}^{+1} f(t,y)\,dy=1$.

9.18. $$W_{n0}=\left|\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n(x)\, e^{-\frac{imVx}{\hbar}}\psi_0(x)\,dx\right|^2=\frac{1}{n!}\left(\frac{m^2V^2a^2}{2\hbar^2}\right)^n\cdot \exp\left(-\frac{m^2V^2a^2}{2\hbar^2}\right).$$

Указание; удобно перейти к системе координат, движущейся вместе с "точкой подвеса".

9.19. Подставить $\Psi(q,t)=\sum_n C_n(t)\psi_n(q,t)\,e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_n(t')dt'}$,

где $$\hat{\mathcal H}(\hat P,q,t)\psi_n(q,t)=E_n(t)\psi_n(q,t),\qquad (1)$$

в нестационарное уравнение Шредингера, умножить обе части этого уравнения слева на $\psi_n^{*}(t)$ и проинтегрировать по координатам системы q ; получим

$$\frac{dC_k(t)}{dt}=-\sum_n C_n(t)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^t(E_k-E_n)\,dt'\right]\int\psi_k^{*}\frac{d\psi_n}{dt}\,dq.$$

Для невырожденного спектра продифференцируем (I) по времени, умножим слева на ψ_k^{*} с $k\neq n$ (выберем функции ψ_k - действительными), проинтегрируем по координатам и получим $$\int\psi_k\frac{d\psi_n}{dt}dq=-\frac{1}{E_k-E_n}\int\psi_k\left(\frac{\partial\hat{\mathcal H}}{\partial t}\right)\psi_n\,dq.$$

Окончательно

$$\frac{dC_k(t)}{dt}=\sum_n{}'\frac{1}{\hbar\omega_{kn}(t)}C_n(t)\left(\frac{\partial\hat{\mathcal H}}{\partial t}\right)_{kn}\exp\left[i\int_0^t\omega_{kn}(t')dt'\right].$$

9.20. Если $\dfrac{\partial\hat{\mathcal H}}{\partial t}$ мало, то из задачи (9.19) следует $C_{kn}\simeq C_{kn}^{(0)}=\delta_{kn}$. В следующем приближении

$$\frac{dC_{kn}(t)}{dt}=\frac{1}{\hbar\omega_{kn}(t)}\left(\frac{\partial\hat{\mathcal H}}{\partial t}\right)_{kn}\exp\left(i\int_0^t\omega_{kn}(t')dt'\right),$$

откуда следует

$$C_{kn}^{(1)}(t)=\frac{1}{\hbar}\int\frac{1}{\omega_{kn}(t')}\left(\frac{\partial\hat{\mathcal H}}{\partial t'}\right)_{kn}\exp\left(i\int_0^{t'}\omega_{kn}(t'')dt''\right)dt'.$$

9.21. Собственные функции и собственные значения "мгновенного" гамильтониана равны:

$$\Psi_n(x,t)=\Psi_n^{\text{осц}}\left(x-\frac{e\mathcal{E}(t)}{\mu\omega^2}\right),\quad E_n(t)=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)-\frac{e^2\mathcal{E}^2(t)}{2\mu\omega^2},$$

$$\left(\frac{\partial\hat{\mathcal{H}}}{\partial t}\right)_{k,0}=-e\sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}\,\dot{\mathcal{E}}(t)\,\delta_{k,1},$$

Откуда следует

$$C_{10}^{(1)}(t\to+\infty)=-\frac{e}{\sqrt{2\hbar\mu\omega^3}}e^{it}.$$

Если электрическое поле при $t\to+\infty$ выключается, то

$$W_{10}=\frac{e^2}{2\hbar\mu\omega}\left|\int_{-\infty}^{+\infty}\mathcal{E}(t)\exp(i\omega t)\,dt\right|^2.$$

10.3. $$\delta_l=-\frac{2\mu k}{\hbar^2}\int_0^\infty J_l^2(kr)V(r)r^2dr,$$

$J_l(kr)$ - сферическая функция Бесселя.

10.4. а) $f(\theta)=\dfrac{2\mu Z_1Z_2e^2}{\hbar^2(1+q^2r_0^2)}$; $q=2k\sin\dfrac{\theta}{2}$;

$$\sigma(E)=16\pi(\mu Z_1Z_2e^2r_0^2/\hbar^2)^2(1+8\mu r_0^2E/\hbar^2)^{-1}.$$

б) $f(\theta)=-\dfrac{\sqrt{\pi}\mu V_0r_0^3}{2\hbar^2}\exp(-q^2r_0^2/4)$;

$$\sigma(E)=\frac{\pi^2\mu V_0^2r_0^4}{4\hbar^2E}\left[1-\exp\left(-\frac{4\mu Er_0^2}{\hbar^2}\right)\right].$$

в) $f(\theta)=\dfrac{2\mu V_0}{\hbar^2}\left[\dfrac{r_0\cos(qr_0)}{q^2}-\dfrac{\sin(qr_0)}{q^3}\right]$; $E=\dfrac{\hbar^2k^2}{2\mu}$;

$$\sigma(E)=\frac{2\pi}{k^2}\left(\frac{\mu V_0r_0^2}{\hbar^2}\right)^2\left[1-\frac{1}{(2qr_0)^2}+\frac{\sin(4kr_0)}{(2kr_0)^3}-\frac{\sin^2(2kr_0)}{(2kr_0)^4}\right].$$

10.5. $$\sigma(E)=\frac{8\pi\mu\alpha^2R^4}{\hbar^2E}\int_0^R\frac{1}{(1+q^2R^2)^2}\left(1+\frac{\sin qa}{qa}\right)q\,dq,$$

R - радиус экранирования; $\alpha=-Ze^2$.

10.6. Фазовый сдвиг в слабых полях есть

$$\delta_0(k)=-\frac{2\mu}{k\hbar^2}\int_0^\infty U(r)\sin^2kr\,dr=-\frac{\mu}{k\hbar^2}\int_0^\infty U(r)[1-\cos(2kr)]\,dr.$$

Умножив на $\left(-\dfrac{k\hbar^2}{2\mu}\right)$ и продифференцировав по k, получим

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d}{dk}[k\delta_0(k)]=\int_0^\infty U(r)\,r\sin 2kr\,dr\equiv\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}r\,U(|r|)e^{-2ikr}dr.$$

Здесь формально введены $r<0$ и определено $U(-|r|)=U(|r|)$ и $\delta_0(k)=-\delta_0(-k_0)$, откуда

$$rU(|r|)=\frac{i\hbar^2}{\mu}\frac{1}{2\mu}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d}{dk}[k\delta_0(k)]e^{2ikr}d(2k),$$

Или

$$U(r)=-\frac{2\hbar}{\pi\mu r}\int_0^\infty\frac{d}{dk}[k\delta_0(k)]\sin(2kr)\,dk.$$

а) $U(r)=\dfrac{c\hbar^2}{\pi\mu r^2}$;

б) $U(r)=-\dfrac{2\alpha\hbar^2}{\mu\sqrt{\beta^2}}e^{-\frac{2r}{\sqrt{\beta}}}$.

10.7. Атомный форм-фактор в основном состоянии атома водорода, равный $F(q)=16/(4+q^2a^2)^2$,

приводит к следующему результату:

$$d\sigma=\left(\frac{e^2}{2\mu v^2}\right)^2[1-F(q)]^2\frac{d\Omega}{\sin^2\frac{\theta}{2}}=4a^2\frac{(8+q^2a^2)^2}{(4+q^2a^2)^2}d\Omega,$$

где $q=2k\sin\dfrac{\theta}{2}$, $d\Omega=\dfrac{\pi}{k^2}dq^2$.

Полное сечение рассеяния равно $\sigma\simeq\dfrac{7\pi}{3k^2}$.

10.8. Из квазиклассического выражения для сечения рассеяния следует, что в процессе рассеяния существенны расстояния, много больше атомных. На этих расстояниях энергия взаимодействия частицы с зарядом Ze и атома с поляризуемостью β равна

$$U(r)=\frac{1}{2}Ze\frac{(\vec{d}\vec{r})}{r^3}=-\beta\frac{(Ze)^2}{2r^4},\quad\vec{d}=\beta\vec{\mathcal{E}}=\beta Ze\vec{r}/r^3.$$

Сечение рассеяния на малые углы, равное

$$\sigma = 4\pi \int_0^\infty \left\{ 1 - \cos\left[\frac{1}{\hbar v} \int_{-\infty}^{+\infty} U\left(\sqrt{\rho^2 + z^2}\right) dz \right] \right\} \rho \, d\rho ,$$

если вместо истинного $U(r)$ подставить найденное выше, оказывается равным

$$\sigma = \pi \Gamma\left(\frac{1}{3}\right) \left(\frac{I\beta Z^2 e^2}{4\pi v} \right)^{2/3}.$$

I0.9. Вероятность аннигиляции в единицу времени для основного состояния позитрония равна

$$dw = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \int \Psi_f^* \hat{V} \Psi_0(r) dV \right|^2 d\rho_f , \quad \Psi_0(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}},$$

$$a_0 = \frac{2\hbar^2}{e^2 \mu},$$

где f характеризует возможные конечные состояния системы фононов, образующихся при аннигиляции, с энергией $\approx 2\mu c^2$ (с точностью до энергии связи позитрона, много меньшей μc^2). Вероятность аннигиляции при столкновении свободных электрона и позитрона имеет вид

$$dw = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \int \Psi_f^* \hat{V} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) dV \right|^2 d\rho_f ,$$

где $\Psi_{\vec{k}}$ - волновая функция свободного относительного движения пары с волновым вектором $\vec{k}_0$.

I0.I0. Согласно принципу детального равновесия между сечениями двух взаимно обратных процессов существует соотношение

$$\frac{\tilde{\sigma}_{A \to B}}{\tilde{\sigma}_{B \to A}} = \frac{g_B P_B^2}{g_A P_A^2} .$$

Здесь $\tilde{\sigma}$ - полное сечение, усредненное по направлениям спинов частиц в начальном состоянии и просуммированное по направлениям спинов частиц в конечном состоянии; P - импульсы относительного движения, взятые при одной и той же полной энергии в системе

центра инерции; g - спиновые статистические веса. Поэтому

$$\frac{\sigma(\omega)}{\sigma(E_e)} = \frac{P_e^2}{2P_\gamma^2} = \frac{\hbar\omega - |E_0|}{\hbar\omega} \cdot \frac{\mu e^2}{\hbar\omega},$$

E_0 - энергия основного состояния атома водорода.

I0.II. Для однофононных процессов матричный элемент возмущения равен

$$\langle f|\hat{V}|i\rangle = -\frac{e}{\mu}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega_k}}\, \vec{e}_{\vec{k}\sigma} \langle 100| e^{-i(\vec{k}\vec{r})} \hat{\vec{P}} |210\rangle.$$

В дипольном приближении ($e^{-i(\vec{k}\vec{r})} \approx$ I) после суммирования по поляризациям фотонов и интегрирования по всем углам вылета фотона получим полную вероятность в единицу времени

$$W = \frac{4}{3} \cdot \frac{e^2 \omega_{21}^3}{\hbar c^3} |\vec{r}_{12}|^2 = \left(\frac{2}{3}\right)^8 \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^4 \frac{c}{a} .$$

Время жизни $\tau = I/P \sim$ I,6 10^{-9} с; ширина уровня $\Gamma = \hbar/\tau \sim$ 0,4I 10^{-6} эв.

I0.I2. Рассматриваемый переход имеет дипольный характер.

$$P_{fi} = 4/3 \frac{\omega^3}{\hbar c^3} |\vec{d}_{fi}|^2 \sim 3 \cdot 10^{-10} c^{-1}.$$

Здесь учтено, что лэмбовский сдвиг составляет

$\hbar\omega \approx$ 4,4 10^{-6} эв.

Двухфотонный переход $2 S_{1/2} \to 1 S_{1/2}$ имеет вероятность 7 c^{-1}.

I0.I3. Взаимодействие электрона с полем излучения имеет вид

$$\hat{V} = \frac{e}{\mu c}(\hat{\vec{A}}\hat{\vec{P}}) + \frac{e^2}{2\mu c^2}\hat{\vec{A}}^2 + \frac{e\hbar}{2\mu c}(\hat{\vec{\sigma}}\hat{\vec{H}}_{изл}).$$

Матричный элемент однофотонного перехода

$$\langle f| \frac{e}{\mu c}(\hat{\vec{A}}\hat{\vec{P}}) + \frac{e\hbar}{2\mu c}(\hat{\vec{\sigma}}\hat{\vec{H}}_{изл})|i\rangle = \frac{e}{\mu}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega_k}}\, \vec{e}_{\vec{k}\sigma} \cdot$$

$$\cdot \langle \Psi_2 | e^{-i(\vec{k}\vec{r})} \left\{ \hat{\vec{P}} - \frac{i\hbar}{2} [\hat{\vec{\sigma}} \times \vec{k}] \right\} | \Psi_1 \rangle ,$$

где $\Psi_1 = \Psi_{2s} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\Psi_2 = \Psi_{1s} \chi_2(\sigma)$. Для определенности считаем, что в начальном состоянии $S_z=+I/2$.

$$\langle \psi_{2s}|e^{-i(\vec{k}\vec{r})}|\psi_{1s}\rangle \simeq -\frac{1}{2}\int \psi_{2s}^{*}(\vec{k}\vec{r})^2\psi_{1s}\,dV = \frac{2^8\sqrt{2}}{3^6}k^2a^2.$$

дифференциальная вероятность излучения фотона

$$dw_{\vec{k}\sigma} = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle f|\hat{V}|i\rangle|^2 d\rho_f = \frac{2^{14}e^2\hbar a^4\omega^5}{3^{12}\pi\mu^2c^7}\cdot$$

$$\cdot\left|\left(\vec{e}_{\vec{k}\sigma}\left[\vec{\sigma}_{12}\times\vec{k}\right]\right)\right|^2 d\Omega_{\vec{k}}.$$

После суммирования по поляризациям фотона и интегрирования по направлениям его вылета получаем

$$w=\frac{1}{3^6\cdot 2^4}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^9\frac{\mu e^4}{\hbar^3}\left|\vec{\sigma}_{12}\right|^2,$$

где $\vec{\sigma}_{12}=\langle\chi_1|\hat{\vec{\sigma}}|\chi_2\rangle$. Полная вероятность перехода (с учетом возможных ориентаций спина) равна

$$W_{2s,1s}=\frac{1}{3^5\cdot 2^4}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^9\frac{\mu e^4}{\hbar^3}\sim 0{,}62\ \mathrm{I0}^{-6}\ c^{-\mathrm{I}}.$$

Время жизни $2s_{1/2}$ - уровня $\tau\sim$ I8 дней. Учет релятивистских поправок приводит к увеличению вероятности приблизительно в I0 раз.

I0.I4. Учет возмущения

$$\hat{V}=-\frac{e}{\mu c}\left(\hat{\vec{A}}(\vec{r})\cdot\hat{\vec{p}}\right)+\frac{e^2}{2\mu c^2}\hat{\vec{A}}^2(\vec{r})$$

во втором порядке теории возмущений по „e" (фактически параметром разложения является $e^2/\hbar c\approx$ I/I37) дает для вероятности перехода в единицу времени

$$dw=\frac{2\pi}{\hbar}\left|V_{fi}+\sum_{\nu}{}'\frac{V_{f\nu}V_{\nu i}}{E_i-E_\nu}\right|^2 d\rho_f,$$

$$E_i=\hbar\omega_1,\quad E_f=\hbar\omega_2+\frac{\vec{p}^{\,2}}{2\mu},$$

где ψ_f, ψ_i - состояния системы "фотон-частица", поскольку $\hat{\vec{p}}\psi_i=0$, то $\sum\limits_{\nu}=0$.

$$\langle f|\hat{V}|i\rangle=\frac{e^2}{2\mu c^2}\langle f|\hat{\vec{A}}^2|i\rangle=\frac{2\pi\hbar e^2}{\mu V\sqrt{\omega_1\omega_2}}\left(\vec{e}_{\vec{k}_1\sigma_1}\cdot\vec{e}_{\vec{k}_2\sigma_2}\right)\cdot$$

$$\cdot\,\delta_{\hbar\vec{k}_1,\,\vec{p}+\hbar\vec{k}_2}.$$

Используя соотношение $d\sigma=\frac{dw}{j}=\frac{V\,dw}{c}$, находим после усреднения по поляризациям падающих и суммирования по поляризациям рассеянных фотонов с помощью соотношений

$$\overline{\left(\vec{e}_{\vec{k}_i\sigma_i}\cdot\vec{e}_{\vec{k}_n\sigma_n}\right)}=\frac{1}{2}\left(\delta_{in}-\frac{k_ik_n}{k^2}\right)$$

для неполяризованных фотонов (θ - угол рассеяния)

$$d\sigma=\frac{e^4}{2\mu^2c^4}(1+\cos^2\theta)\,d\Omega,$$

$$\sigma=\frac{8\pi}{3}\frac{e^4}{\mu^2c^4}.$$

т.е. результаты совпадают с результатами классической электродинамики.

II.I. $(ns,\ n's)$: ^3S, ^1S.

$(ns,\ n'p)$: ^3P, ^1P.

$(ns,\ n'd)$: ^3D, ^1D.

$(np,\ n'p)$: ^3D, ^1D, ^3P, ^1P, ^3S, ^1S.

II.2. $(np)^3$: $\underline{^4S}$, ^2D, ^2P.

$(nd)^2$: $\underline{^3F}$, ^3P, ^1G, ^1D, ^1S.

$(nd)^3$: $\underline{^4F}$, ^4P, ^2H, ^2G, ^2F, $^2\underset{2}{D}$, ^2P.

$(nd)^5$: $\underline{^6S}$, ^4G, ^4F, ^4D, ^4P, ^2I, ^2H, $^2\underset{2}{G}$, $^2\underset{2}{F}$, $^2\underset{3}{D}$, ^2P, ^2S

$(nf)^2$: $\underline{^3H}$, ^3F, ^3P, ^1I, ^1G, ^1D, ^1S.

Подчеркнуты термы основных состояний. Если терм встречается n ($n>$ I) раз, число n помещено под символом терма.

II.3. ${}^1S_0$; ${}^3S_1$; ${}^3P_{210}$; ${}^2D_{5/2,\,3/2}$; ${}^4D_{7/2,\,5/2,\,3/2,\,1/2}$

II.4. 20 волновых функций для конфигурации $(np)^3$ $|{}^{2S+1}L, M_L, M_S\rangle$:

$$|{}^4S,0,\pm\tfrac{3}{2}\rangle = (\overset{\pm}{1}\overset{\pm}{0}\overset{\pm}{-1});\ |{}^4S,0,\pm\tfrac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt3}\Big[(\overset{\pm}{1}\overset{\pm}{0}\overset{\mp}{-1}) + (\overset{\mp}{1}\overset{\pm}{0}\overset{\pm}{-1}) +$$

$$+(\overset{\mp}{1}\overset{\pm}{0}\overset{\pm}{-1})\Big];\ |{}^2P,1,\pm\tfrac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt2}\Big[(\overset{\pm}{1}\overset{\mp}{0}\overset{\pm}{0}) - (\overset{\pm}{1}\overset{\mp}{1}\overset{\pm}{-1})\Big];$$

$$|{}^2P,0,\pm\tfrac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt2}\Big[(\overset{\pm}{1}\overset{\mp}{-1}\overset{\pm}{0}) - (\overset{\pm}{0}\overset{\mp}{1}\overset{\pm}{-1})\Big];\ |{}^2P,-1,\pm\tfrac{1}{2}\rangle =$$

$$= \frac{1}{\sqrt2}\Big[(\overset{\pm}{1}\overset{\mp}{-1}\overset{\pm}{-1}) - (\overset{\pm}{0}\overset{\mp}{0}\overset{\pm}{-1})\Big];\ |{}^2D,2,\pm\tfrac{1}{2}\rangle = (\overset{\pm}{1}\overset{\mp}{1}\overset{\pm}{0});$$

$$|{}^2D,1,\pm\tfrac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt2}\Big[(\overset{\pm}{1}\overset{\mp}{0}\overset{\pm}{0}) + (\overset{\pm}{1}\overset{\mp}{1}\overset{\pm}{-1})\Big];\ |{}^2D,0,\pm\tfrac{1}{2}\rangle =$$

$$= \pm\frac{1}{\sqrt6}\Big[2(\overset{\pm}{1}\overset{\mp}{0}\overset{\pm}{-1}) + (\overset{\pm}{1}\overset{\mp}{-1}\overset{\pm}{0}) + (\overset{\pm}{0}\overset{\mp}{1}\overset{\pm}{-1})\Big];\ |{}^2D,-1,\pm\tfrac{1}{2}\rangle =$$

$$= \frac{1}{\sqrt2}\Big[(\overset{\pm}{1}\overset{\mp}{-1}\overset{\pm}{-1}) + (\overset{\pm}{0}\overset{\mp}{0}\overset{\pm}{-1})\Big];\ |{}^2D,-2,\pm\tfrac{1}{2}\rangle = (\overset{\pm}{0},\overset{\mp}{-1},\overset{\pm}{-1}).$$

I20 волновых функций для конфигурации $(nd)^3$ приведены в [12] и [14].

II.5. У полностью заполненной оболочки $(nl)^{4l+2}$ только один терм ${}^1S$. Конфигурации $(nl)^k$ и $(nl)^{4l+2-k}$ взаимно дополняют друг друга до заполненной оболочки и имеют одни и те же термы.

II.6. $\varkappa = 2/3$.

II.7. Энергия иона H^- при $\alpha = \frac{1}{a}$, $\beta = \frac{1}{4a}$ равна $E = -0{,}512\frac{e^2}{a}$.

II.8. $E = -11\, e^2/4a$.

II.9. а) $2Z^{1/3}$;

б) $1{,}33\, Z^{-1/3} a$;

в) $0{,}510\, Z^{1/3}\frac{e^2}{a}$;

г) $0{,}765\, Z^{4/3}\frac{e^2}{a}$.

д) $0{,}765\, Z^{7/3}\frac{e^2}{a}$;

е) $1{,}24\, Z^{2/3} e^2/\hbar$;

ж) $1{,}16\, Z^{1/3}$;

и) $0{,}809\, Z^{-2/3}$.

II.10. $n=0$ $\quad k=0$

$n=1$ $\quad k=1$

$n=2$ $\quad k=2,0$

$n=3$ $\quad k=3,1$. Например, для $J=1/2$, $K=1$:

$$\mathcal{E} = -\Lambda$$

$$\sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|J=\tfrac12, M_J=+\tfrac12\rangle|K=1, M_K=-1\rangle - \frac{1}{\sqrt3}|J=\tfrac12, M_J=-\tfrac12\rangle\cdot$$

$$\cdot|K=1, M_K=0\rangle;\ \sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|J=\tfrac12, M_J=-\tfrac12\rangle|K=1, M_K=+1\rangle -$$

$$-\frac{1}{\sqrt3}|J=\tfrac12, M_J=+\tfrac12\rangle|K=1, M_K=0\rangle;$$

$$\mathcal{E} = \frac{\Lambda}{2}$$

$$|J=\tfrac12, M_J=\tfrac12\rangle|K=1, M_K=+1\rangle;\ |J=\tfrac12, M_J=-\tfrac12\rangle|K=1, M_K=-1\rangle;$$

$$\frac{1}{\sqrt3}|J=\tfrac12, M_J=+\tfrac12\rangle|K=1, M_K=-1\rangle + \sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|J=\tfrac12, M_J=-\tfrac12\rangle|K=1, M_K=0\rangle;$$

$$\frac{1}{\sqrt3}|J=\tfrac12, M_J=-\tfrac12\rangle|K=1, M_K=+1\rangle + \sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|J=\tfrac12, M_J=+\tfrac12\rangle|K=1, M_K=0\rangle.$$

II.11.
$$\langle\Psi|\sum_{i=1}^{N}\Omega_i|\Psi\rangle = \sum_{k=1}^{N}\langle u_k(\vec r_1)|\Omega_1|u_k(\vec r_1)\rangle.$$

$$\langle\Psi|\sum_{i>j=1}^{N}\Omega_{ij}|\Psi\rangle = \sum_{l>k=1}^{N}\Big[\langle u_l(\vec r_1)u_k(\vec r_2)|\Omega_{12}|$$

$$|u_l(\vec r_1)u_k(\vec r_2)\rangle - \langle u_l(\vec r_1)u_k(\vec r_2)|\Omega_{12}|u_k(\vec r_1)u_l(\vec r_2)\rangle\Big].$$

I2.I. б) $A \longrightarrow \hat A_c = -\hat A$, $\varphi \longrightarrow \varphi_c = -\varphi$

в) Преобразование $\hat C$ как зарядовое сопряжение осуществляет переход от частицы к античастице.

Указание: рассмотреть постоянное электромагнитное поле.

I2.2. Указание: уравнение, описывающее бесспиновую частицу во внешнем скалярном поле $U(\vec{r},t)$, имеет вид:

$$\left\{c^2\hat{\vec{p}}^2+\mu^2c^4+2\mu c^2 U\right\}\Psi=-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi .$$

I2.4. Сделав замену $\psi(r)=\frac{R(r)}{r}$, получаем уравнение

$$-\frac{d^2}{dr^2}R+\frac{2\mu}{\hbar^2}U(r)R=\frac{E^2-\mu^2c^4}{\hbar^2c^2}R .$$

При $\varepsilon^2-\mu^2c^4<0$ решение имеет вид

$$R(r)=\begin{cases}A\sin\sqrt{\frac{2\mu U_0}{\hbar^2}-\varkappa^2r}, & r<a,\\ Be^{-\varkappa r}, & r>a,\end{cases}$$

где $\varkappa=\sqrt{(\mu^2c^4-E^2)/\hbar^2c^2}>0$.

Уровни энергии определяются из уравнения:

$$tg\sqrt{\frac{2\mu U_0a^2}{\hbar^2}-\varkappa_n^2a^2}=-\frac{1}{\varkappa_n a}\sqrt{\frac{2\mu U_0a^2}{\hbar^2}-\varkappa_n^2a^2}.$$

При уменьшении глубины ямы все уровни $E_n>0$ идут вверх и переходят в континуум $E\geqslant\mu c^2$, а уровни $E_n<0$ сливаются с континуумом $E<-\mu c^2$. Энергетический спектр частицы и античастицы во внешнем поле одинаков, т.е. поле действует на них одинаково (в отличие от электростатического поля).

I2.5. Сделав замену $\psi(\vec{r})=R(r)Y_{lm}(\vartheta,\alpha)$, получим уравнение

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{d}{dr}+\frac{\hbar^2[(l+\frac{1}{2})^2-\frac{1}{4}]}{2\mu r^2}-\frac{Ze^2E}{\mu c^2 r}-\frac{Z^2e^4}{2\mu c^2r^2}\right\}R=\frac{E^2-\mu^2c^4}{2\mu c^2}R .$$

Это уравнение переходит в уравнение для нерелятивистской функции с помощью замены

$$\frac{ZE}{\mu c^2}\longrightarrow Z,\ \left[(l+\frac{1}{2})^2-Z^2\alpha^2\right]\longrightarrow(l+\frac{1}{2})^2,\ \frac{E^2-\mu^2c^4}{2\mu c^2}\longrightarrow$$
$$\longrightarrow E_{n_rl}.$$

Откуда находим

$$E_{n_rl}=\mu c^2\left\{1-\frac{Z^2\alpha^2}{Z^2\alpha^2+\left[n_r+\frac{1}{2}+\sqrt{(l+\frac{1}{2})^2-Z^2\alpha^2}\right]}\right\}^{1/2},$$

где $\alpha=\frac{e^2}{\hbar c}$. Заметим, что отрицательные E_{n_rl}, которые можно описать заменой $Z\longrightarrow -Z$, не описывают спектра, т.к. потенциал становится отталкивательным.

I2.6. Когда энергия частицы близка к энергии покоя, стационарное уравнение Клейна-Гордона-Фока

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta+e\varphi-\frac{(e\varphi)^2}{2\mu c^2}+\frac{\varepsilon}{\mu c^2}e\varphi-\frac{\varepsilon^2}{2\mu c^2}\right\}\psi=$$
$$=\varepsilon\psi,\quad E=\mu c^2+\varepsilon,$$

аналогично уравнению Шредингера с эффективной потенциальной энергией

$$U_{эфф}=e\varphi+\frac{e\varepsilon}{\mu c^2}\varphi-\frac{(e\varphi)^2}{2\mu c^2}-\frac{\varepsilon^2}{2\mu c^2}\approx e\varphi-\frac{(e\varphi)^2}{2\mu c^2}.$$

Если $|e\varphi|>2\mu c^2$, то $U_{эфф}<0$.

I2.8. Поскольку $\hat{\mathcal{H}},\hat{\vec{P}},\hat{\gamma}_5$ коммутируют друг с другом, существуют общие собственные функции $\psi_{E,\vec{p},\mu}$, причем $\hat{\gamma}_5\psi_{E,\vec{p},\mu}=\mu\psi_{E,\vec{p},\mu}$ и $\mu=\pm 1$. Нетрудно найти, что при $E=pc>0$ спиральность равна $-\mu/2$, при $E=-pc<0$ спиральность равна $\mu/2$.

I2.9. Оператор $\hat{P}_+$ проектируем на состояния со спиральностью $-1/2$ для частицы и $+1/2$ для античастицы. Заметим, что

$\hat{P}_{\pm}\Psi = \tilde{\Psi}$ при зарядовом сопряжении принимает вид
$\hat{P}_{\mp}\Psi_C = \tilde{\Psi}_C$, $\hat{C}\hat{\gamma}_5 = -\hat{\gamma}_5\hat{C}$.

I2.I0. Из уравнения Дирака

$$\left[c\hat{\vec{\alpha}}\left(\hat{\vec{P}}-\frac{e}{c}\vec{A}\right)+\mu c^2\hat{\beta}\right]\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}=E\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}$$

следует уравнение для φ:

$$\left(E^2-\mu^2c^4\right)\varphi = c^2\left[\hat{\vec{\sigma}}\cdot\left(\hat{\vec{P}}-\frac{e}{c}\vec{A}\right)\right]^2\varphi,$$

что приводит к выражению

$$\left\{\frac{1}{2\mu}\left(\hat{\vec{P}}-\frac{e}{c}\vec{A}\right)^2-\frac{e\hbar}{2\mu c}\left(\hat{\vec{\sigma}}\vec{H}\right)\right\}\varphi=\frac{E^2-\mu^2c^4}{2\mu c^2}\varphi,$$

отличающемуся заменой E на $E^2-\mu^2c^4/2\mu c^2$ от уравнения Паули для частицы со спином I/2. При калибровке $\vec{A}(0, H_0x, 0)$ получаем искомое решение

$$E^2_{nP_z\sigma_z}-\mu^2c^4=2\mu c^2\left[\hbar\omega_0\left(n+\frac{1}{2}\right)-\frac{e\hbar H_0}{2\mu c}\sigma_z+\frac{P_z^2}{2\mu}\right],$$

$n = 0, I, \ldots$

$$\varphi_{nP_yP_z\sigma_z}=C\,e^{\frac{i}{\hbar}(P_y y+P_z z)}\exp\left[-\frac{1}{2a^2}\left(x-\frac{cP_y}{eH_0}\right)^2\right]\cdot$$

$$\cdot H_n\left(\frac{1}{a}\left(x-\frac{cP_y}{eH_0}\right)\right)\varphi_{\sigma_z},\quad \omega_0=\frac{|e|\hbar H_0}{\mu c},\quad a=\sqrt{\frac{\hbar c}{|e|H_0}},$$

где φ_{σ_z} - собственная функция оператора $\hat{\sigma}_z$. Заметим, энергетические спектры частицы и античастицы в магнитном поле одинаковы.

I3.I. $\left[\hat{v}_i, \hat{v}_k\right]=i\frac{e\hbar}{\mu^2c}\varepsilon_{ikl}H_l$, $\hat{\vec{v}}=\frac{1}{\mu}\left(\hat{\vec{P}}-\frac{e}{c}\vec{A}\right)$.

I3.2. $\hat{x}_0=\hat{x}-\frac{1}{\mu\omega}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}-\frac{e}{c}A_y\right)$,

$$\hat{y}_0=\hat{y}+\frac{1}{\mu\omega}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}-\frac{e}{c}A_y\right)$$

$$\hat{P}_\perp^2=\frac{1}{\mu^2\omega^2}\left(\hat{v}_x^2+\hat{v}_y^2\right).$$

I3.3. а) $\Psi_{E,P_x,P_y}=\frac{1}{2\pi\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}(P_y y+P_z z)}\Psi_n^{осц}\left(x-\frac{cP_y}{eH_0}\right)$;

б) $\Psi_{E,P_x,P_z}=\frac{1}{2\pi\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}(P_x x+P_z z)}\Psi_n^{осц}\left(y+\frac{cP_x}{eH_0}\right)$,

$$E-\frac{P_z^2}{2\mu}=\frac{|e|\hbar H_0}{\mu c}\left(n+\frac{1}{2}\right).$$

I3.4. Указание: калибровочное преобразование потенциалов можно учесть как унитарное преобразование:

$U=e^{\frac{ie}{\hbar c}f}$, где $\vec{A}'=\vec{A}+\nabla f$, т.е. $f=H_0xy$.

т.о.

$$\Psi_{nP_xP_z}=e^{-i\frac{eH_0}{\hbar c}xy}\int C_{P_x}^{P_y}(n)\,\Psi_{nP_yP_z}\,dP_y,$$

причем

$$\Psi_{nP_xP_y}=\sum_{n'}\int C_{nP_xP_z}^{n'P_y'P_z'}\Psi_{n'P_y'P_z'}\,dP_y'\,dP_z',$$

и

$$C_{nP_xP_z}^{n'P_y'P_z'}=\int\Psi^*_{n'P_y'P_z'}\Psi_{nP_xP_z}\,dV.$$

I3.5. $$\Psi_{E,m,P_z}(\rho,z,\varphi)=\frac{1}{2\pi\sqrt{\hbar}}e^{i\left(m\varphi+\frac{P_z\cdot z}{\hbar}\right)}f(\rho),$$

где $f(x)=e^{-\frac{x}{2}}x^{\frac{|m|}{2}}W(x)$,

$$W(x) = cF\left[\frac{1}{2}\left(1+|m| - \frac{e}{|e|}m - K_t^2 a^2\right), |m|+1, x\right]$$

– вырожденная гипергеометрическая функция.

$$x = \frac{\rho^2}{2a^2}, \quad a = \sqrt{\frac{\hbar c}{|e| H_0}}, \quad K_t^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2} - \frac{p_z^2}{\hbar^2}.$$

Функция F сводится к полиному при условии

$$\frac{1}{2}\left(1+|m| - \frac{e}{|e|}m - K_t^2 a^2\right) = -\gamma, \qquad \gamma = 0, 1, 2, \ldots .$$

Обозначив $2n+1 = 2\gamma + 1 + |m| - \frac{e}{|e|}m \quad (n = 0, 1, 2, \ldots)$,

получаем

$$(E_t)_n = E_n - \frac{p_z^2}{2\mu} = \hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad \omega_0 = \frac{|e| H_0}{\mu c},$$

$$\Psi_{n, m, p_z} = C\left(\frac{\rho}{a}\right)^{|m|} \exp\left[im\varphi + \frac{i}{\hbar}p_z \cdot z - \frac{\rho^2}{4a^2}\right] \cdot$$

$$\cdot F\left(-\gamma, |m|+1, \rho^2/2a^2\right).$$

13.6. Указание: использовать формальную аналогию оператора $\hat{\rho}_\perp^2$, как и ρ_0^2, с гамильтонианом гармонического осциллятора.

$$(\hat{\rho}_\perp^2)_n = a^2(2n+1), \quad n = 0, 1, \ldots \qquad a^2 = \frac{\hbar c}{|e| H_0},$$

$$(\hat{\rho}_0^2)_k = a^2(2k+1), \quad k = 0, 1, \ldots$$

13.7. Используя $\Gamma(\nu) = \int_0^\infty e^{-x} x^{\nu-1} dx$,

$$\Gamma(2x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} 2^{2x-1} \Gamma(x) \Gamma\left(x + \frac{1}{2}\right), \quad \Gamma(n) = (n-1)!,$$

можно найти

$$\langle \rho \rangle = a\sqrt{2} \frac{\Gamma\left(n + \frac{3}{2}\right)}{\Gamma(n+1)}, \quad \langle \rho^2 \rangle = 2a^2(n+1).$$

Наиболее вероятное ρ, которому отвечает максимум функции $2\pi\rho|\Psi_n|^2$, равно $a\sqrt{2n+1}$.

13.8. $E_m = 2\beta H_0 m, \quad \Psi_m = |m\rangle, \quad \langle \mu_{H_0} \rangle = m\hbar,$

$m = -S, -S+1, \ldots, S.$

13.9. Диамагнитная восприимчивость равна

$$\chi = -\frac{e^2}{6\mu c^2} \sum_{i=1}^{2} \langle r_i^2 \rangle = -\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 a^3 Z_{эфф}^2,$$

если взять функцию основного состояния в виде

$$\Psi = \frac{Z_{эфф}^2}{\pi a^3} \exp\left[-\frac{Z_{эфф}}{a}(r_1 + r_2)\right] \chi(S=0).$$

Для атома гелия $Z_{эфф} = 27/16$.

13.10. а) $E_m = g_z \beta_N H_0 m + d\left[m^2 - \frac{1}{3}I(I+1)\right],$

$\Psi_m = |m\rangle, \quad m = -\frac{3}{2}, \ldots, +\frac{3}{2}.$

б) $E_{(\pm)} = \mp\frac{h}{2} \pm \sqrt{\frac{3}{4}h^2 + 3\beta^2}, \quad h = g_z \beta_N H_0,$

$$\Psi_1^{(\pm)} = \sin\gamma_{(\pm)} \left|\pm\frac{3}{2}\right\rangle + \cos\gamma_{(\pm)} \left|\mp\frac{1}{2}\right\rangle,$$

$$\Psi_2^{(\pm)} = -\cos\gamma_{(\pm)} \left|\pm\frac{3}{2}\right\rangle + \sin\gamma_{(\pm)} \left|\mp\frac{1}{2}\right\rangle, \quad \mathrm{tg}\,\gamma_\pm = -\frac{\beta\sqrt{3}}{\pm\frac{3}{2}h - E_\pm}.$$

13.11. $$E_1 = -\frac{1}{4}\mathcal{J}_z - \frac{\mathcal{J}_x + \mathcal{J}_y}{4}, \quad \Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+-\rangle - |-+\rangle\right),$$

$$E_2 = -\frac{1}{4}\mathcal{J}_z + \frac{\mathcal{J}_x + \mathcal{J}_y}{2}, \quad \Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+-\rangle + |-+\rangle\right),$$

$$E_{3,4} = \frac{D_z}{4} \pm \sqrt{\left(\frac{D_x - D_y}{4}\right)^2 + h^2},$$

$$\Psi_3 = \sin\alpha\,|++\rangle + \cos\alpha\,|--\rangle,$$

$$\Psi_4 = -\cos\alpha\,|++\rangle + \sin\alpha\,|--\rangle,$$

$$\operatorname{tg}\alpha = \frac{(D_x - D_y)}{4\left(\frac{1}{4}D_z + h - E_3\right)}.$$

Отношение вероятностей переходов

$$W_{32}/W_{42} = \left(1+\sin 2\alpha / 1-\sin 2\alpha\right).$$

МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Сдано в набор I5.05.90 г. Подписано в печать 23.08.90 г.
Форм.бум. 60 х 84 I/I6. Печ.л.2,4. Тираж 600. Заказ 600.
Бесплатно.

Лаборатория оперативной полиграфии КГУ
420008 Казань, Ленина, 4/5