Данная серия методичек посвящается лучшему преподавателю по квантовой теории в седьмом семестре
Парфёнову Константину Владимировичу

Константин Владимирович:
Одновременно со мной на ФФ учился принц какой-то маленькой, но гордой африканской страны. Он всегда был с 2 слугами: сам он был низенький, а вот слуги высокие статные, и он на их фоне очень комично смотрелся. На лекции принц не ходил, зато всегда ходил один из слуг, делал конспект. Как же он сдавал экзамены? Экзамен по ТФКП я сдавал одновременно с принцем. Ему достался стандартный билет стандартный, что-то там про вычеты
Идёт время, почти все сдали, кроме меня (я хочу "отл") и принца.
Тогдашний лектор по ТФКП Гончаровский подсаживается к принцу. Звали его Каба Секу, если что
"Каба Секу, сдавать будете?"
Каба Секу рисует кривую линию и говорит: «Ват фам кажется, что это линия кривая, а она прямая. Ват насталька она прямая, насталька плаха я знаю русский язык»
и ещё 3 мин заливал что-то подобное
Гончаровский: Это классно, а что там по вычетам?
Принц повторяет на 3 мин свой невероятный рассказ
Гончаровский ставит неуд.
Каба Секу встаёт в полный (хоть и небольшой) свой рост, поднимает вверх руки и кричит на всю аудиторию: "ДИСКРИМИНАСИЯ!"
И, медленно пятясь затылком вперёд к выходу, повторяет "ДИСКРИМИНАСИЯ! ДИСКРИМИНАСИЯ!"
Через 5 мин Гончаровскому прилетает указание из учебной части ставить 3. Так я узнал, как тот принц сдавал все экзамены.

Потом после выпуска принца на ФФ пришло письмо из доживавшей последние годы КПСС: в той африканской стране открывается физический институт, возглавляемый, конечно, Каба Секу. Но негоже директору быть без докторской степени... Не мог бы ФФ присвоить принцу звание доктора)

upmsu.phys.msu.ru/db?search=1986&page=11

Фамилия	Имя	Отчество	Группа	Кафедра	Год выпуска
Нгуен	Ван	Тханг	631(1986)	физики атмосферы	1986
Рузанова	Ирина	Викторовна	631(1986)	физики атмосферы	1986
Андреев	Андрей	Николаевич	612(1986)	физики атомного ядра	1986
Варанкин	Павел	Вениаминович	612(1986)	физики атомного ядра	1986
Денисов	Леонид	Владиславович	612(1986)	физики атомного ядра	1986
Древаль	Валерий	Викторович	612(1986)	физики атомного ядра	1986
Дрягин	Сергей	Владимирович	612(1986)	физики атомного ядра	1986
Забродин	Александр	Евгениевич	612(1986)	физики атомного ядра	1986
Кондратенко	Елена	Петровна	612(1986)	физики атомного ядра	1986
Ли де ла Съерра	Инес	Маргар	612(1986)	физики атомного ядра	1986
Лубиан	Эраола	Эктор	612(1986)	физики атомного ядра	1986
Мартинес	Эрнандес	Роберто	612(1986)	физики атомного ядра	1986
Нгуен	Мак	Ха	612(1986)	физики атомного ядра	1986
Фомичев	Андрей	Сергеевич	612(1986)	физики атомного ядра	1986
Храпов	Алексей	Алексеевич	612(1986)	физики атомного ядра	1986
Эрнандес	Торрес	Дебора	612(1986)	физики атомного ядра	1986
Акимов	Валерий	Дмитриевич	622(1986)	физики колебаний	1986
Барышникова	Ирина	Николаевна	622(1986)	физики колебаний	1986
Басова	Марина	Александровна	622(1986)	физики колебаний	1986
Биленко	Игорь	Антонович	622(1986)	физики колебаний	1986
Бувина	Екатерина	Геннаевна	622(1986)	физики колебаний	1986
Бутусов	Дмитрий	Александрович	622(1986)	физики колебаний	1986
Гордеев	Сергей	Анатольевич	112(1980)	физики колебаний	1986
Иванов	Максим	Владиславович	622(1986)	физики колебаний	1986
Каба	Секу	Ибрахима	622(1986)	физики колебаний	1986
Карпенко	Игорь	Николаевич	622(1986)	физики колебаний	1986
Одинцов	Аркадий	Анатольевич	622(1986)	физики колебаний	1986
Падерин	Сергей	Анатольевич	622(1986)	физики колебаний	1986
Рудных	Светлана	Ивановна	622(1986)	физики колебаний	1986
Самойлов	Алексей	Валентинович	622(1986)	физики колебаний	1986

<<Пред. 1 2 ... 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 След.>>

В этой методичке мы здесь

Сразу перейдём к задачам:

Задача №1:
Дан одномерный гармонический осциллятор. Одна из частиц сидит на нулевом уровне, другая на первом возбуждённым. Они взаимодействуют с энергией $U(x_1, x_2) = \frac{q_e^2}{|x_1 - x_2|}$. Найти величину расщепления уровней.

1) Проверяем, что есть взаимодействие между частицами: $\frac{U_0}{|x_1 - x_2|}$.

2) Мы решаем задачу в приближении теории возмущений: строим ВФ из одночастичных по рецепту из прошлой методички, а далее считаем ДВЕ поправки по теории возмущений:
главную
и
обменную

Проверяем: «Одна из частиц сидит на нулевом уровне, другая на первом возбуждённым» - да, мы строим ВФ из одночастичных. Так что выполнены все условия.
Тогда начинаем решать. Энергетическая поправка состоит из двух: **главной** и **обменной**.
Главная поправка:

$$\Gamma = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dx_2 * |\varphi_{\text{а}}(x_1)|^2 |\varphi_{\text{б}}(x_2)|^2 V(x_1, x_2)$$

Имеет простой ясный смысл: $|\varphi_{\text{а}}(x_1)|^2$ – вероятность встретить электрон в точке x_1, $|\varphi_{\text{б}}(x_2)|^2$ – вероятность встретить электрон в точке x_2, а $V(x_1, x_2)$ - энергия их взаимодействия в случае, когда один в x_1, а другой в x_2. Если электроны отталкиваются, то Γ>0 (т.е. энергия поднимается), если притягиваются – Γ<0 (т.е. энергия снижается). Логично!

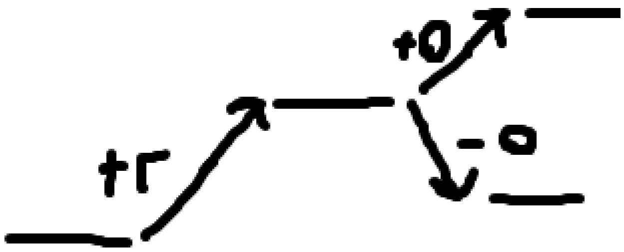
Но есть и обменная поправка:

$$\text{О} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dx_2 * \varphi_{\text{а}}(x_1) * \varphi_{\text{а}}^*(x_2) * \varphi_{\text{б}}^*(x_1) * \varphi_{\text{б}}(x_2) V(x_1, x_2)$$

И её нужно и вычитать, и прибавлять. У нас будет два уровня:

Уровень №1: $E = E_{\text{а}} + E_{\text{б}} + \Gamma - \text{О}$

Уровень №2: $E = E_{\text{а}} + E_{\text{б}} + \Gamma + \text{О}$



В данной задаче $E_{\text{а}} = \frac{h\omega}{2}$, $E_{\text{б}} = \frac{3h\omega}{2}$. Γ и О найдёте с помощью Вольфрама

Откуда брать одночастичные $\varphi_{\text{а}}(x)$ и $\varphi_{\text{б}}(x)$? Из учебника Попова по атомке:

$$\psi_n(x) = N_n H_n(x/a) \exp\left(-x^2/2a^2\right)$$

где нормировочный множитель N_n - определяется как

$$N_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! a \sqrt{\pi}}}.$$

Где $H_n(y)$ – полиномы Эрмита:

$$H_0(\xi) = 1,\ H_1(\xi) = 2\xi,\ H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2,\ H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi, \ldots$$

Не будет лишним сказать, что обменная поправка не имеет никакого физсмысла. Это никакое не новое, неизвестное науке взаимодействие. Это прямое следствие того, что мы используем ПРИБЛИЖЕНИЕ – а именно теорию возмущений. Используйте приближение? Ну, «ешьте с кашей» (С) Силаев все те гадости, которые вам придётся терпеть ради приближения.
В самосогласованном поле – другом приближении, которое мы будем изучать в следующей методичке – обменного интеграла нет. Т.е. он – это чисто «проблема» теории возмущений.

Задача №2:

С КР №3 Парфа:

4. (35) Найти величину расщепления уровня, отвечающего конфигурации $1s^1\ 2p^1$ для системы двух спинорных частиц с гамильтонианом:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}_1^2}{2m} - \frac{e^2}{r_1} + \frac{\hat{\vec{p}}_2^2}{2m} - \frac{e^2}{r_2} + \frac{e^2}{32}\left(\frac{me}{\pi\hbar^2}\right)^3 \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2$$

Проверяем условия:
1) Есть взаимодействие между частицами. Проверяем, что оно есть:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}_1^2}{2m} - \frac{e^2}{r_1} + \frac{\hat{\vec{p}}_2^2}{2m} - \frac{e^2}{r_2} + \boxed{\frac{e^2}{32}\left(\frac{me}{\pi\hbar^2}\right)^3 \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2}$$

2) Мы решаем задачу в приближении теории возмущений: строим ВФ из одночастичных «по рецепту», а далее считаем поправки по теории возмущений. Здесь по условию мы должны сделать то же.

Приступаем. Считаем две наши поправки: главную Г и обменную О. Усложнение от предыдущей задачей – интегралы будут трёхмерными, а не одномерными (шестерными, а не двойными).

$$\Gamma = \iiint_{R^3} dV_1 \iiint_{R^3} dV_2\ |\varphi_{\text{а}}(\boldsymbol{r_1})|^2 |\varphi_{\text{б}}(\boldsymbol{r_2})|^2 V(\boldsymbol{r_1}, \boldsymbol{r_2})$$

Где $\varphi_{\text{а}}()$ и $\varphi_{\text{б}}()$ – одночастичные ВФ 1s и 2p состояний соответственно. Естественно, мы их находим из того уже учебника Попова:

$$\psi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$$

где R(r)

$$1s \qquad R_{10}(r) = 2(Z/a_0)^{3/2} \exp(-Zr/a_0),$$

$$2s \qquad R_{20}(r) = 2(Z/2a_0)^{3/2}(1 - Zr/2a_0)\exp(-Zr/2a_0),$$

$$2p \qquad R_{21}(r) = \frac{2}{\sqrt{3}}(Z/2a_0)^{3/2} \cdot Zr/2a_0 \cdot \exp(-Zr/2a_0).$$

Угловая часть для 1s тождественная единица, а для 2p:
если m=0, то cosθ
если m=+-1, то $sin\theta e^{\pm i\varphi}$.
Таким образом, одночастичные ВФ:

$$\varphi_{\text{а}}(\boldsymbol{r}) = \varphi_{1s}(\boldsymbol{r}) = \left(\frac{2}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$$

если m=0, то

$$\varphi_{\text{б}}(\boldsymbol{r}) = \varphi_{2s}(\boldsymbol{r}) = \frac{2}{\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} * \frac{ZR}{2a_0} * \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) cos\theta$$

если m=+-1, то

$$\varphi_{\text{б}}(\boldsymbol{r}) = \varphi_{2s}(\boldsymbol{r}) = \frac{2}{\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} * \frac{ZR}{2a_0} * \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) sin\theta e^{\pm i\varphi}$$

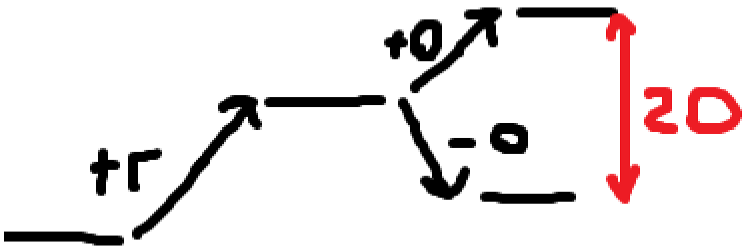
(фаза роли не играет, она убьётся, когда мы будем брать комплексное сопряжение)

Ну и обменный интеграл будет

$$\text{O} = \iiint_{R^3} dV_1 \iiint_{R^3} dV_2 * \varphi_{\text{а}}(\boldsymbol{r_1}) * \varphi_{\text{а}}^*(\boldsymbol{r_2}) * \varphi_{\text{б}}^*(\boldsymbol{r_1}) * \varphi_{\text{б}}(\boldsymbol{r_2}) V(\boldsymbol{r_1}, \boldsymbol{r_2})$$

Энергии одночастичных состояний $E_{\text{а}}$ и $E_{\text{б}}$ тоже стырим из учебника Попова:

Так как от нас спрашивают именно «величину расщепления», то Г нам считать не надо. Нам нужно 2O:



Ну что, осталось подсчитать всего один интеграл – O - и мы получим 35 баллов от Парфёнова… ой, а интеграл шестимерный.

Поэтому-то эта задача и стоит 35 баллов.

Делать нечего, считаем:

$$\int_0^{+\infty} r_1^2 dr_1 \int_0^{\pi} sin\theta_1 d\theta_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \int_0^{+\infty} r_2^2 dr_2 \int_0^{\pi} sin\theta_2 d\theta_2 \int_0^{2\pi} d\varphi_2\, \varphi_{\text{а}}(\boldsymbol{r_1})\varphi_{\text{а}}^*(\boldsymbol{r_2})\varphi_{\text{б}}^*(\boldsymbol{r_1})\varphi_{\text{б}}(\boldsymbol{r_2})V(\boldsymbol{r_1},\boldsymbol{r_2})$$

Напоминаю, что якобиан перехода в сферическую СК – $r^2 \sin\theta$

Подставляем одночастичные ВФ. Сначала для m=0:

$$\int_0^{+\infty} r_1^2 dr_1 \int_0^{\pi} sin\theta_1 d\theta_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \int_0^{+\infty} r_2^2 dr_2 \int_0^{\pi} sin\theta_2 d\theta_2 \int_0^{2\pi} d\varphi_2$$

$$\left(\frac{2}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{r_1}{a_0}\right)\left(\frac{2}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{r_2}{a_0}\right)\left(\frac{2}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{r_1}{a_0}\right) cos\theta_1 \left(\frac{2}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{r_2}{a_0}\right) cos\theta_2 V(\boldsymbol{r_1},\boldsymbol{r_2})$$

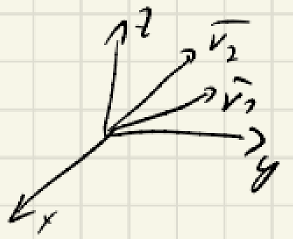
А теперь подставляем $V(\boldsymbol{r_1},\boldsymbol{r_2})$. Напомню, что это $\frac{e^2}{32}\left(\frac{me}{\pi\hbar^2}\right)^3 \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2$.

Эмиль, мой одногруппник, предлагает записать так:

$$V(\bar r_1-\bar r_2) = C\left(r_1^2+r_2^2-2\underbrace{(\bar r_1\bar r_2)}_{(1)}\right)$$

$$= \underbrace{r_1\cos\theta_1\, r_2\cos\theta_2}_{(1)} + \underbrace{r_1\sin\theta_1\cos\varphi_1\, r_2\sin\theta_2\cos\varphi_2}_{(2)} +$$

$$+\underbrace{r_1 r_2\sin\theta_1\sin\theta_2\sin\varphi_1\sin\varphi_2}_{(3)}$$



Но можно проще, если потребовать, чтобы оси СК второго по порядку интегрирования электрона были направлены так, что ось z его СК была направлена вдоль первого по порядку интегрирования электрона. В этом случае $V(\boldsymbol{r_1},\boldsymbol{r_2}) = \frac{e^2}{32}\left(\frac{me}{\pi h^2}\right)^3 (r_1^1 + r_2^2 - 2r_1r_2cos\theta_2)$

Фуф! Теперь всё. Расчехляйте ваш Вольфрам ☺

Вот вам задача попроще, тоже с КР Парфа:

Задача №3:

2. (20) Пусть одночастичные ВФ 1s и 2s состояний спинорных частиц в самосогласованном поле имеют вид: $\phi_1 = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-r/a}$ и $\phi_2 = \frac{1}{\sqrt{8\pi a^3}}\left(1-\frac{r}{2a}\right)e^{-r/2a}$. Найти величину обменного расщепления при $\hat V = \frac{\alpha}{r_1 r_2}$.

От нас опять спрашивают 2О. Погнали считать:

$$О = \iiint\limits_{R^3} dV_1 \iiint\limits_{R^3} dV_2 * \varphi_{\text{а}}(\boldsymbol{r_1}) * \varphi_{\text{а}}^*(\boldsymbol{r_2}) * \varphi_{\text{б}}^*(\boldsymbol{r_1}) * \varphi_{\text{б}}(\boldsymbol{r_2}) V(\boldsymbol{r_1},\boldsymbol{r_2})$$

$\varphi_{\text{а}}(\boldsymbol{r})$ и $\varphi_{\text{б}}(\boldsymbol{r})$ нам дали в условии и они центрально-симметричны. Потенциал тоже зависит только от r_1 и r_2. Отлично, значит, интегралы по $\theta_1,\theta_2,\varphi_1,\varphi_2$ будут тривиальными и дадут нам $\int_0^\pi sin\theta_1 d\theta_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_1 * \int_0^\pi sin\theta_2 d\theta_2 \int_0^{2\pi} d\varphi_2 = 4\pi * 4\pi = (4\pi)^2$.

Останутся нетривиальные интегралы по r_1 и r_2:

$$О = (4\pi)^2 \int\limits_0^{+\infty} dr_1 \int\limits_0^{+\infty} dr_2 * \varphi_{\text{а}}(r_1) * \varphi_{\text{а}}^*(r_2) * \varphi_{\text{б}}^*(r_1) * \varphi_{\text{б}}(r_2) V(r_1,r_2)$$

Так как с нас спрашивают 2О, сразу домножим на 2:

$$32\pi^2 \int_0^{+\infty} dr_1 \int_0^{+\infty} dr_2 * \varphi_{\text{а}}(r_1) * \varphi_{\text{а}}^*(r_2) * \varphi_{\text{б}}^*(r_1) * \varphi_{\text{б}}(r_2) V(r_1, r_2)$$

Подставляем одночастичные ВФ:

$$32\pi^2 \int_0^{+\infty} r_1^2 dr_1 \int_0^{+\infty} r_2^2 dr_2 * \exp\left(-\frac{r_1}{a}\right) \exp\left(-\frac{r_2}{a}\right)\left(1-\frac{r_1}{2a}\right) \exp\left(-\frac{r_1}{a}\right)\left(1-\frac{r_2}{2a}\right) \exp\left(-\frac{r_2}{a}\right) * \frac{\alpha}{r_1 r_2}$$

Он разбивается на произведение одиночных:

$$I = \int_0^{+\infty} r^2 dr \exp\left(-\frac{r}{a}\right)\left(1-\frac{r}{2a}\right) \exp\left(-\frac{r}{a}\right) * \frac{\sqrt{\alpha}}{r}$$

А ответ тогда: $32\pi^2 I^2$.

I уже элементарно берётся:

$$I = \sqrt{\alpha} \int_0^{+\infty} r dr \exp\left(-\frac{2r}{a}\right)\left(1-\frac{r}{2a}\right)$$

Берётся элементарно по частям, доведите уж до ответа сами.

Задача №4:

Разумеется, тоже с КРЗ Парфёнова:

(20) Определить полный спин системы из двух тождественных спинорных частиц в потенциале линейного гармонического осциллятора со слабым взаимодействием $V(x_1\ x_2) = \alpha\,|x_1 - x_2|$, находящейся в низшем возбужденном состоянии.

Тут у нас всплыл спин. А он тут при чём? Смотрите: мы можем координатную функцию (КФ) или симметризовать, или антисимметризовать, а спиновую (СФ) – или антисимметризовать, или симметризовать.

Если мы координатную часть симметризуем, то мы добавляем к энергии обменный интеграл, если антисимметризуем – вычитаем. Т.е. нам нужно выяснить знак обменного интеграла I. Если I >0, то нам лучше для минимизации E вычитать I, получая антисимметричную КФ=>симметричную СФ (S=1), а если I<0, то нам лучше для минимизации E прибавлять I, получая симметричную КФ=>антисимметричную СФ (S=0).

Считаем I:

$$0 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dx_2 * \varphi_{\text{а}}(x_1) * \varphi_{\text{а}}^*(x_2) * \varphi_{\text{б}}^*(x_1) * \varphi_{\text{б}}(x_2) V(x_1, x_2)$$

Подставляем СФ гарм.осциллятора и потенциал:

$$f_0(x) = \exp\left(-x^2\right)$$

$$f_1(x) = 2x\exp\left(-x^2\right)$$

$$V(u,v) = |u - v|$$

$$\int_{-10}^{10}\int_{-10}^{10} f_0(u) f_0(v) f_1(u) f_1(v) V(u,v)\,du\,dv$$

$$= -0.443113462644$$

https://www.desmos.com/calculator/wsgz3vo73p

Естественно, интеграл мы будем считать с помощью Десмоса (мы же не перваки, чтобы честно считать). Он <0. Следовательно, нам лучше для минимизации Е прибавлять I, получая симметричную КФ=>антисимметричную СФ (S=0).

Ответ: суммарный спин системы 0.

Напоследок вопрос: может ли обменный интеграл оказаться равен 0?

Ответ: случайно, при некоторых СФ $\varphi_{\text{а}}(\quad), \varphi_{\text{б}}(\quad), V(x_1, x_2)$ – может.

Пример: https://www.desmos.com/calculator/kjr2tyzpan

Но, как правило, такие задачи не задаются, потому что без обменного расщепления не интересно.