Содержание

Тема 2: Проекции спина.

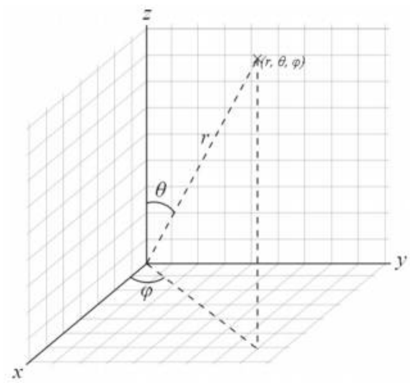
****

(5.2') Частица со спином $s=1/2$ находится в состоянии с определенным значением проекции $s_z=+1/2$. Определить вероятности возможных значений проекции спина на ось z', наклоненную к оси z на угол θ.

-

Проекции спина на ось z' равны

$$s_{z'} = s_x \sin\theta\cos\varphi + s_y \sin\theta\sin\varphi + s_z\cos\theta\ .$$



$$\vec{S}_n = \frac{1}{2}\vec{n}\vec{\sigma} = \frac{1}{2}\left(\sigma_x\sin\theta\cos\varphi + \sigma_y\sin\theta\sin\varphi + \sigma_z\cos\theta\right) =$$

$$= \frac{1}{2}\left[\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\sin\theta\cos\varphi + \begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}\sin\theta\sin\varphi + \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\cos\theta\right] = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi}\\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta\end{pmatrix}.$$

Волновые функции имеют вид

$$\psi_{s_z=1/2} = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \qquad \psi_{s_z=-1/2} = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}.$$

$$\overline{s_n}_{\,s_z=1/2} = \frac{1}{2}\psi^+\hat{s}_n\psi = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi}\\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\cos\theta\ .$$

$$\overline{s_n}_{\,s_z=-1/2} = \frac{1}{2}\psi^+\hat{s}_n\psi = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi}\\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = -\frac{1}{2}\cos\theta\ .$$

Таким образом,

$$\overline{s_n} = s_z\cos\theta\ .$$

Среднее значение через вероятности того или иного значения записывается как

$$\overline{s_n} = \frac{1}{2}w_{s_z=+1/2} + \left(-\frac{1}{2}\right)w_{s_z=-1/2}\ .$$

$$w_{s_z=+1/2} + w_{s_z=-1/2} = 1 \qquad w_{s_z=-1/2} = 1 - w_{s_z=+1/2}\ .$$

$$\overline{s_n} = \frac{1}{2} w_+ - \frac{1}{2}\left(1 - w_+\right) = w_+ - \frac{1}{2} = s_z \cos\theta \, .$$

Отсюда получаем

$$\overline{s_n} = \frac{1}{2} w_+ - \frac{1}{2}\left(1 - w_+\right) = w_\pm = \frac{1 \pm 2 s_z \cos\theta}{2} \, .$$

Учитывая $s_z = 1/2$, получаем

$$w_{s_n = 1/2} = \frac{1 + 2 \cdot (1/2) \cos\theta}{2} = \frac{1 + \cos\theta}{2} = \cos^2 \frac{\theta}{2} \, .$$

$$w_{s_n = -1/2} = 1 - \cos^2 \frac{\theta}{2} = \sin^2 \frac{\theta}{2} \, .$$

****

(5.XX) Частица со спином s=1 находится в состоянии с определенным значением проекции s_z=1. Определить вероятности возможных значений проекции спина на ось z', наклоненную к оси z на угол θ.

-

Задача аналогична случаю $l = 1$. Поэтому см. (3.24).

Определить вероятности различных значений проекции можно исходя из выражения среднего значения через вероятности. В общем случае эта формула имеет вид (здесь обозначения w_0 и $w_{\pm 1}$ обозначают вероятности проекции спина на ось z', равные соответственно 0 и ±1):

$$\overline{s_{z'}} = (+1) \cdot w_{+1} + \cancel{(0) \cdot w_0} + (-1) \cdot w_{-1} \, .$$

Если добавить аналогичную формулу для среднего квадрата проекции

$$\overline{s_{z'}^2} = (+1)^2 \cdot w_{+1} + \cancel{(0)^2 \cdot w_0} + (-1)^2 \cdot w_{-1} \, ,$$

то получается система из двух линейных уравнений для w_{+1} и w_{-1}. Таким образом,

$$w_{\pm 1} = \frac{1}{2}\left(\overline{s_{z'}^2} \pm \overline{s_{z'}} \right) ,$$

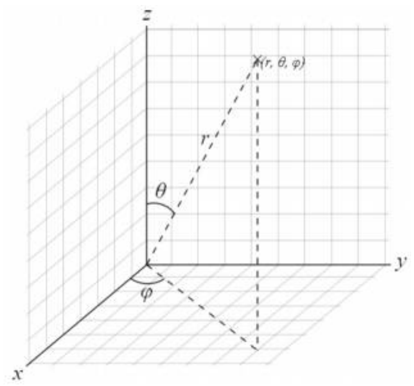
У спина, равного единице, проекции на любую ось могут принимать значения только $-1, \; 0, \; 1$. Поэтому сумма вероятностей этих значений равна единице, $w_{-1} + w_0 + w_1 = 1$, и тогда вероятность нулевого значения проекции оказывается равной

$$w_0 = 1 - \left(w_{+1} + w_{-1} \right) = 1 - \overline{s_{z'}^2} \, .$$

Таким образом, задача сводится к получению выражений для $\overline{s_{z'}}$ и $\overline{s_{z'}^2}$.

Проекции спина на ось z' равны

$$s_{z'} = s_x \sin\theta \cos\varphi + s_y \sin\theta \sin\varphi + s_z \cos\theta \, .$$



В состоянии с определенной проекцией на ось z средние значения $\overline{s_x}$ и $\overline{s_y}$ равны нулю, а $\overline{s_z} = s_z$. Поэтому

$$s_{z'} = s_z \cos\theta \equiv m \cos\theta .$$

Квадраты операторов:

$$\hat{s}_{z'}^2 = \left(\hat{s}_x \sin\theta \cos\varphi + \hat{s}_y \sin\theta \sin\varphi + \hat{s}_z \cos\theta \right)^2 =$$
$$= \hat{s}_x^2 \sin\theta \cos\varphi + \hat{s}_y^2 \sin^2\theta \sin^2\varphi + \hat{s}_z^2 \cos^2\theta + \left(\hat{s}_x \hat{s}_y + \hat{s}_y \hat{s}_x \right) \sin^2\theta \sin\varphi \cos\varphi + .$$
$$+ \left(\hat{s}_x \hat{s}_z + \hat{s}_z \hat{s}_x \right) \sin\theta \cos\varphi \cos\theta + \left(\hat{s}_y \hat{s}_z + \hat{s}_z \hat{s}_y \right) \sin\theta \sin\varphi \cos\theta$$

Их усреднение дает

$$\overline{\hat{s}_{z'}^2} = \overline{\hat{s}_x^2} \sin\theta \cos\varphi + \overline{\hat{s}_y^2} \sin^2\theta \sin^2\varphi + \overline{\hat{s}_z^2} \cos^2\theta + \overline{\left(\hat{s}_x \hat{s}_y + \hat{s}_y \hat{s}_x \right)} \sin^2\theta \sin\varphi \cos\varphi +$$
$$+ \overline{\left(\hat{s}_x \hat{s}_z + \hat{s}_z \hat{s}_x \right)} \sin\theta \cos\varphi \cos\theta + \overline{\left(\hat{s}_y \hat{s}_z + \hat{s}_z \hat{s}_y \right)} \sin\theta \sin\varphi \cos\theta = .$$
$$= \overline{\hat{s}_x^2} \sin\theta \cos\varphi + \overline{\hat{s}_y^2} \sin^2\theta \sin^2\varphi + m^2 \cos^2\theta = \left(\overline{\hat{s}_x^2} = \overline{\hat{s}_y^2} \right) = \overline{\hat{s}_x^2} \sin^2\theta + m^2 \cos^2\theta$$

Выражение для $\overline{\hat{s}_x^2}$ можно получить, воспользовавшись формулой

$$\hat{s}^2 = \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2 .$$

Ее усреднение дает

$$s\left(s+1 \right) = \overline{\hat{s}_x^2} + \overline{\hat{s}_y^2} + m^2$$
$$s\left(s+1 \right) - m^2 = \overline{\hat{s}_x^2} + \overline{\hat{s}_y^2} = 2\overline{\hat{s}_x^2} \;\Rightarrow\; \overline{\hat{s}_x^2} = \frac{1}{2}\left(s\left(s+1 \right) - m^2 \right) .$$

Подставим $\overline{\hat{s}_x^2}$ отсюда в и получим

$$\overline{\hat{s}_{z'}^2} = \frac{1}{2}\left(s\left(s+1 \right) - m^2 \right) \sin^2\theta + m^2 \cos^2\theta .$$

Таким образом, подставляя и в и , получим

$$w_{\pm1}=\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}\left(s\left(s+1\right)-m^2\right)\sin^2\theta+m^2\cos^2\theta\pm m\cos\theta\right)=$$

$$=\frac{1}{4}\left(s\left(s+1\right)\sin^2\theta-3m^2\sin^2\theta+2m^2\sin^2\theta+2m^2\cos^2\theta\pm2m\cos\theta\right)=$$

$$=\frac{1}{4}\left(s\left(s+1\right)\sin^2\theta-3m^2\sin^2\theta+2m^2\pm2m\cos\theta\right)=\left\{s=1,\ s\left(s+1\right)=2\right\},$$

$$=\frac{1}{4}\left(\left(2-3m^2\right)\sin^2\theta+2m^2\pm2m\cos\theta\right)=\left\{m=1\right\}=$$

$$=\frac{1}{4}\left(2-\sin^2\theta\pm2\cos\theta\right)=\frac{1}{4}\left(1+\cos^2\theta\pm2\cos\theta\right)$$

$$w_0=1-\overline{s_{z'}^2}=1-\frac{1}{2}\left(s\left(s+1\right)-m^2\right)\sin^2\theta-m^2\cos^2\theta=$$

$$=\left\{s=1,\ s\left(s+1\right)=2\right\}=1-\frac{1}{2}\left(2-m^2\right)\sin^2\theta-m^2\cos^2\theta=.$$

$$=\left(1-m^2\right)\cos^2\theta+\frac{m^2}{2}\sin^2\theta=\left\{m=1\right\}=\frac{\sin^2\theta}{2}$$

****

<u>(5.XXX)</u> Доказать, что среднее значение оператора квадрупольного момента $Q_{\mu\nu}$ в состоянии с полным моментом $J=1/2$ равно нулю.

-

$$Q_{\mu\nu}=\sum_a e_a\left(3r_\mu^a r_\nu^a-\delta_{\mu\nu}r_a^2\right).$$

$$\hat{Q}_{\mu\nu}=C\left(\hat{J}_\mu\hat{J}_\nu+\hat{J}_\nu\hat{J}_\mu-\frac{2}{3}\delta_{\mu\nu}\vec{J}^2\right),$$

Причем оказывается, что $C=\dfrac{3Q}{2J\left(2J-1\right)}$. Таким образом, окончательный вид оператора квадрупольного момента выглядит так:

$$\boxed{\hat{Q}_{\mu\nu}=\frac{3Q}{2J\left(2J-1\right)}\left(\hat{J}_\mu\hat{J}_\nu+\hat{J}_\nu\hat{J}_\mu-\frac{2}{3}\delta_{\mu\nu}\vec{J}^2\right)}.$$

Однако, для решения данной задачи достаточно оператора кв. момента в виде

В условии задачи сказано, что $J=1/2$. Таким образом, здесь можно воспользоваться аппаратом матриц Паули. Они разработаны для спина $s=1/2$, однако работают для любого момента, равного $1/2$, независимо от природы этого момента. Таким образом, комбинацию $\hat{J}_\mu\hat{J}_\nu+\hat{J}_\nu\hat{J}_\mu-\frac{2}{3}\delta_{\mu\nu}\vec{J}^2$ из можно записать как

$$\hat{J}_\mu\hat{J}_\nu+\hat{J}_\nu\hat{J}_\mu-\frac{2}{3}\delta_{\mu\nu}\vec{J}^2=\frac{1}{2}\sigma_\mu\cdot\frac{1}{2}\sigma_\nu+\frac{1}{2}\sigma_\nu\cdot\frac{1}{2}\sigma_\mu-\frac{2}{3}\delta_{\mu\nu}\cdot\frac{1}{4}\vec{\sigma}^2=$$
$$=\frac{1}{4}\left(\sigma_\mu\sigma_\nu+\sigma_\nu\sigma_\mu-\frac{2}{3}\delta_{\mu\nu}\vec{\sigma}^2\right),$$

Используя свойства матриц Паули

$$\boxed{\sigma_\mu\sigma_\nu=\delta_{\mu\nu}+i\varepsilon_{\mu\nu\lambda}\sigma_\lambda,\qquad \vec{\sigma}^2=3\cdot\hat{1}},$$

получим

$$\sigma_\mu \sigma_\nu + \sigma_\nu \sigma_\mu - \frac{2}{3}\delta_{\mu\nu}\vec{\sigma}^2 = \cancel{\delta_{\mu\nu}} + \cancel{i\varepsilon_{\mu\nu\lambda}\sigma_\lambda} + \cancel{\delta_{\nu\mu}} + \cancel{i\varepsilon_{\nu\mu\lambda}\sigma_\lambda} - \cancel{\frac{2}{3}\delta_{\mu\nu}\cdot 3} = 0\,,$$

Таким образом, при $J = 1/2$ оператор $\hat{Q}_{\mu\nu}$ равен нулю, а тогда и его среднее значение равно нулю.

Тема 3: Проекторы. Функции спиновых операторов.

****

(5.9) Найти явное выражение оператора вида $\hat{F} = \hat{F}\left(a + \vec{b}\vec{\sigma}\right)$. Здесь $F(x)$ – произвольная функция переменной x, a – постоянная, а $\vec{b}$ – обычный вектор.

-

Для решения задачи найдем общий вид для оператора $\hat{F} = \hat{F}\left(\hat{f}\right)$, где $\hat{f}$ – Эрмитов оператор, потом просто подставим $\hat{f} = a + \vec{b}\vec{\sigma}$.

Предварительная задача (1.27): показать, что для эрмитова оператора $\hat{f}$, имеющего N собственных значений, верно выражение $\hat{f}^N = \sum_{i=0}^{N-1} c_i f^i$ (имеется в виду $\hat{f}^0 = \hat{1}$).

Для доказательства придумаем оператор $\hat{G}$:

$$\hat{G} = \prod_{i=1}^{N}\left(f - f_i\right) = \left(f - f_1\right)\left(f - f_2\right)..\left(f - f_N\right),$$

где f_i – собственные значения $\hat{f}$.

Свойством эрмитова оператора является то, что произвольная функция может быть разложена по его собственным функциям:

$$\Phi = \sum_i c_i \psi_i \; .$$

Отсюда следует, что оператор $\hat{G}$, действуя на произвольную функцию, обращает ее в нуль (для любого слагаемого разложения найдется множитель в , обращающий результат в нуль). То есть $\hat{G} = 0$, что можно переписать в таком виде (раскроем скобки):

$$0 = \left(f - f_1\right)\left(f - f_2\right)..\left(f - f_N\right) = f^N - f_1 f^{N-1} + f_1 f_2 f^{N-2} + ... + \left(-1\right)^N f_1 f_2 ... f_N,$$

откуда

$$f^N = f_1 f^{N-1} - f_1 f_2 f^{N-2} + ... + \left(-1\right)^{N+1} f_1 f_2 ... f_N \; \blacksquare$$

Решим теперь задачу (1.52) о произвольном операторе $F\left(\hat{f}\right)$, где $\hat{f}$ – эрмитов оператор, причем $\hat{f}$ имеет N собственных значений.

Как $\hat{f}$, так и $F\left(\hat{f}\right)$ будет иметь N собственных значений, причем он представим в виде

$$\hat{F} = \sum_{n=0}^{N-1} c_n f^n \; .$$

Коэффициенты c_n можно определить из системы уравнений

$$\hat{F}\left(f_i\right) = \sum_{n=0}^{N-1} c_n f_i^n \; .$$

При $\hat{F}\left(f_i\right) = \sum_{n=0}^{N-1} c_n f_i^n$ система принимает вид

$$\begin{cases} F(f_1) = c_0 + c_1 f_1 \\ F(f_2) = c_0 + c_1 f_2 \end{cases},$$

откуда

$$\hat{F} = \frac{f_2 F(f_1) - f_1 F(f_2)}{f_2 - f_1} + \frac{F(f_1) - F(f_2)}{f_1 - f_2}\hat{f}.$$

Рассмотрим теперь основное задание задачи: найти вид $\hat{F} = \hat{F}\left(a + \vec{b}\vec{\sigma}\right)$. Для этого достаточно подставить собственные значения $a + \vec{b}\vec{\sigma}$, которые равны $a \pm b$ (b - длина вектора $\vec{b}$), в . Ответ получается таким:

$$\hat{F}\left(a + \vec{b}\vec{\sigma}\right) = \frac{F(a+b) + F(a-b)}{2} + \frac{F(a+b) - F(a-b)}{2b}\vec{b}\vec{\sigma}.$$

****

<u>(5.13)</u> Найти проекционные операторы $\hat{P}_{s_z=\pm 1/2}$ на состояния с определенным значением проекции спина $s_z = \pm 1/2$ на ось *z*.

-

Проекционный оператор $\hat{P}_{f_i}$, проектирующий на состояния с определенным значением f_i физической величины f – такой линейный оператор, который, действуя на функции Ψ_{f_i}, переводит "свои" функции в себя же, а все остальные функции обращает в нуль (вообще, по определению, $\hat{P} = \hat{P}^2$):

$$P_{f_i}\Psi_{f_j} = \delta_{f_i f_j}\Psi_{f_j} = \begin{cases} \Psi_{f_i}, & f_i = f_j \\ 0, & f_i \neq f_j. \end{cases}$$

Таким образом, необходимо найти такой оператор, который будет иметь свойства (упростим обозначения: $\hat{P}_{s_z=\pm 1/2} \equiv \hat{P}_{\pm 1/2}$):

$$\begin{aligned} P_{+1/2}\Psi_\uparrow &= \Psi_\uparrow, & P_{+1/2}\Psi_\downarrow &= 0 \\ P_{-1/2}\Psi_\uparrow &= 0, & P_{-1/2}\Psi_\downarrow &= \Psi_\downarrow \end{aligned}.$$

Как и матрицы Паули, он, действуя на вектор-столбцы, должен иметь вид матрицы 2x2. Надо не забывать, что $\hat{P}_{+1/2}$ и $\hat{P}_{-1/2}$ – два разных оператора.

Выписывая в матричном виде, для $\hat{P}_{+1/2}$ получаем

$$\hat{P}_{+1/2}\Psi_\uparrow \equiv \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{P}_{+1/2}\Psi_\downarrow \equiv \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

a, *b*, *c*, *d* находятся методом пристального вглядывания. Имеем

$$a = 1, \qquad b = c = d = 0.$$

Для $\hat{P}_{-1/2}$, получаем

$$\hat{P}_{-1/2}\Psi_\uparrow \equiv \begin{pmatrix} k & l \\ m & n \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{P}_{-1/2}\Psi_\downarrow \equiv \begin{pmatrix} k & l \\ m & n \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

k, *l*, *m*, *n* находятся методом пристального вглядывания. Получаем

$$n = 1, \qquad k = l = m = 0.$$

Иными словами,

$$\hat{P}_{+1/2} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{P}_{-1/2} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Очевидно, что эти же результаты можно получить, используя комбинацию $\sigma_0 \pm \sigma_z$. Здесь, как и обычно, σ_0 – единичная матрица. Таким образом, в единой записи

$$\hat{P}_{\pm 1/2} = \frac{1}{2}\left(\sigma_0 \pm \sigma_z \right) \quad \bullet$$

Решение в общем виде – см. ниже задачу (5.22)

Тема 4: Две частицы со спином 1/2.

<u>(5.17)</u> Найти собственные функции и собственные значения операторов

$$\hat{S}^2 = \left(\vec{s}_1 + \vec{s}_2\right)^2 = \vec{s}_1^{\,2} + \vec{s}_2^{\,2} + 2\vec{s}_1\vec{s}_2 = \frac{1}{4}\left(\vec{\sigma}_1^{\,2} + \vec{\sigma}_2^{\,2} + 2\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2\right),$$

$$\hat{S}_z = s_{1z} + s_{2z} = \frac{1}{2}\left(\hat{\sigma}_{1z} + \hat{\sigma}_{2z}\right),$$

$$\chi_\uparrow\left(s_{1z}\right) \equiv \chi_\uparrow(1) = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \qquad \chi_\downarrow\left(s_{1z}\right) \equiv \chi_\downarrow(1) = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

$$\boxed{\begin{gathered}\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}, \qquad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix}0 & -i\\i & 0\end{pmatrix}, \qquad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}\\ \hat{\sigma}^2 = \hat{\sigma}_x^2 + \hat{\sigma}_y^2 + \hat{\sigma}_z^2 = 3\cdot\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}\end{gathered}}$$

Выпишем результаты действия матриц $\hat{\sigma}_{x,y,z}$ на функции $\chi_\uparrow$, $\chi_\downarrow$:

$$\hat{\sigma}_x\chi_\uparrow = \begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \chi_\downarrow, \qquad \hat{\sigma}_y\chi_\uparrow = \begin{pmatrix}0 & -i\\i & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\i\end{pmatrix} = i\chi_\downarrow \quad \text{etc.}$$

Соберем это все в таблицу

$$\boxed{\begin{array}{llll}\sigma_x\chi_\uparrow = \chi_\downarrow & \sigma_y\chi_\uparrow = i\chi_\downarrow & \sigma_z\chi_\uparrow = \chi_\uparrow & \vec{\sigma}^2\chi_\uparrow = 3\cdot\chi_\uparrow\\ \sigma_x\chi_\downarrow = \chi_\downarrow & \sigma_y\chi_\downarrow = -i\chi_\uparrow & \sigma_z\chi_\downarrow = -\chi_\downarrow & \vec{\sigma}^2\chi_\downarrow = 3\cdot\chi_\downarrow\end{array}}$$

Понадобятся (окажутся удобными) и такие комбинации:

$$\boxed{\begin{aligned}&\left(\sigma_x + i\sigma_y\right)\chi_\uparrow = \left(\sigma_x - i\sigma_y\right)\chi_\downarrow = 0\\ &\left(\sigma_x - i\sigma_y\right)\chi_\uparrow = 2\chi_\downarrow\\ &\left(\sigma_x + i\sigma_y\right)\chi_\downarrow = 2\chi_\uparrow\end{aligned}}$$

Наиболее общим видом собственной функции должен быть

$$\boxed{\Psi(1,2) = a\chi_\uparrow(1)\,\chi_\uparrow(2) + b\chi_\downarrow(1)\,\chi_\downarrow(2) + c\chi_\uparrow(1)\,\chi_\downarrow(2) + d\chi_\uparrow(2)\,\chi_\downarrow(1)}\,.$$

Найдем сначала с.ф. и с.з. проекции суммарного спина

$$\hat{S}_z\Psi = S_z\Psi\,.$$

Подействовав операторами спина на $\Psi(1,2)$ вида , получим

$$a\chi_\uparrow(1)\,\chi_\uparrow(2) - b\chi_\downarrow(1)\,\chi_\downarrow(2) =$$
$$= S_z\left(a\chi_\uparrow(1)\,\chi_\uparrow(2) + b\chi_\downarrow(1)\,\chi_\downarrow(2) + c\chi_\uparrow(1)\,\chi_\downarrow(2) + d\chi_\uparrow(2)\,\chi_\downarrow(1)\right).$$

При линейной независимости $\chi_\uparrow(1)\,\chi_\uparrow(2)$, $\chi_\downarrow(1)\,\chi_\downarrow(2)$, $\chi_\uparrow(1)\,\chi_\uparrow(2)$, $\chi_\uparrow(2)\,\chi_\downarrow(1)$ возможны следующие варианты: $S_z \neq 0$ (тогда $S_z = \pm 1$) и $S_z = 0$:

$$\Psi = a\chi_\uparrow(1)\,\chi_\uparrow(2), \qquad S_z = +1$$
$$\Psi = b\chi_\downarrow(1)\,\chi_\downarrow(2), \qquad S_z = -1$$
$$\Psi = c\chi_\uparrow(1)\,\chi_\downarrow(2) + d\chi_\uparrow(2)\,\chi_\downarrow(1), \qquad S_z = 0$$

Для дальнейшей работы будет удобно тождественно представить произведение $\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2$ следующим образом:

$$\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2 = \frac{1}{2}\left(\sigma_{1x} + i\sigma_{1y}\right)\left(\sigma_{2x} - i\sigma_{2y}\right) + \frac{1}{2}\left(\sigma_{1x} - i\sigma_{1y}\right)\left(\sigma_{2x} + i\sigma_{2y}\right) + \sigma_{1z}\sigma_{2z}\,.$$

Тогда

$$\hat{S}^2\left(a\chi_\uparrow(1)\,\chi_\uparrow(2)\right)=2a\chi_\uparrow(1)\,\chi_\uparrow(2)$$

$$\hat{S}^2\left(b\chi_\downarrow(1)\,\chi_\downarrow(2)\right)=2b\chi_\downarrow(1)\,\chi_\downarrow(2)$$

$$S(S+1)=2 \quad\Leftrightarrow\quad S=1$$

$$|a|=1, \qquad |b|=1$$

Итак, ищем с.ф. и с.з. оператора квадрата суммарного спина:

$$\hat{S}^2\Psi=S(S+1)\,\Psi$$

С учетом выписанных ранее свойств и полученных формул получим выражение

$$(c+d)\left(\chi_\uparrow(1)\,\chi_\downarrow(2)+\chi_\downarrow(1)\,\chi_\uparrow(2)\right)=S(S+1)\left(c\chi_\uparrow(1)\,\chi_\downarrow(2)+d\chi_\uparrow(2)\,\chi_\downarrow(1)\right).$$

Ввиду линейной независимости $\chi_\uparrow(1)\,\chi_\uparrow(2)$, $\chi_\downarrow(1)\,\chi_\downarrow(2)$, $\chi_\uparrow(1)\,\chi_\uparrow(2)$, $\chi_\uparrow(2)\,\chi_\downarrow(1)$ оно сводится к системе линейных уравнений

$$\begin{cases} c\cdot\left(S(S+1)-1\right)-d\cdot 1=0 \\ c\cdot 1-d\cdot\left(S(S+1)-1\right)=0 \end{cases}$$

Для того, чтобы она имела нетривиальные решения, необходимо, чтобы ее определитель был равен нулю, что эквивалентно

$$\left(S(S+1)-1\right)^2-1=0 \qquad\Leftrightarrow\qquad S(S+1)-1=\pm 1.$$

Таким образом, есть варианты $S=0$ и $S=1$. Рассмотрим их:

$S=0\Rightarrow\ d=-c$

$$\Psi_{asym}=c\left(\chi_\uparrow(1)\,\chi_\downarrow(2)-\chi_\uparrow(2)\,\chi_\downarrow(1)\right),$$

$S=1\Rightarrow\ d=c$

$$\Psi_{sym}=c\left(\chi_\uparrow(1)\,\chi_\downarrow(2)+\chi_\uparrow(2)\,\chi_\downarrow(1)\right).$$

Из нормировки следует

$$c=\frac{e^{i\nu}}{\sqrt{2}},$$

причем свободную фазу ν, дабы не осложнять, принимаем равной нулю.

$$\boxed{\left.\begin{matrix} \chi_\uparrow(1)\,\chi_\uparrow(2) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\chi_\uparrow(1)\,\chi_\downarrow(2)+\chi_\downarrow(1)\,\chi_\uparrow(2)\right) \\ \chi_\downarrow(1)\,\chi_\downarrow(2) \end{matrix}\right\} \quad \Big| S=1 \quad \Big| S(S+1)=2 \quad \begin{cases} S_z=+1 \\ S_z=0 \\ S_z=-1 \end{cases}}$$

$$\boxed{\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\chi_\uparrow(1)\,\chi_\downarrow(2)-\chi_\downarrow(1)\,\chi_\uparrow(2)\right) \quad |S=0 \quad |S(S+1)=0 \quad |S_z=0}$$

Тема 5: Две частицы со спином 1/2.

****

(5.18) Показать, что оператор $\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2$ в состояниях системы из двух частиц, отвечающих определенному значению суммарного спина, также имеет определенное значение.

Учитывая $\vec{S}^2 = \frac{1}{4}\left(\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2\right)^2$ и $\vec{\sigma}^2 = 3\sigma_0$, получим

$$\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2 = 2\vec{S}^2 - 3 .$$

Таким образом, собственные функции оператора $\vec{S}^2$ являются и собственными функциями оператора $\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2$. Случай $S=0$ соответствует собственному значению -3, а случай $S=1$ соответствует собственному значению $+1$.

****

(5.21) Найти явный вид оператора $\hat{F} = F\left(a + b\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2\right)$, где $F(x)$ - произвольная функция переменной x, а a и b – числа.

Из (5.18) следует, что собственные значения у $a + b\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2$ суть $a-3b$ и $a+b$. Подставляя это в , получим:

$$\hat{F} = \frac{(a-3b)\,F(a+b) - (a+b)\,F(a-3b)}{-3b-b} + \frac{F(a+b) - F(a-3b)}{b+3b}\left(a + b\cdot\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2\right) .$$

После преобразований получаем

$$\hat{F} = \frac{3F(a+b) + F(a-3b)}{4} + \frac{F(a+b) - F(a-3b)}{4}\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2 \quad \bullet$$

****

(5.22) Используя результат (5.18), найти проекционные операторы $\hat{P}_{S=0,1}$ на состояния двух частиц со спином $S=1/2$, отвечающие определенному значению суммарного спина частиц.

Задача в общем виде: как связать проекционный оператор и собственные функции и собственные состояния.

Эрмитов оператор $\hat{f}$ имеет N с.з. Найти вид проекционного оператора для состояний с заданным значением величины *f*.

Решение: Пусть N=2. Тогда из условия $\hat{P}(f_1)\psi_{f_2} = 0$ следует $\hat{P}(f_1) = a\left(\hat{f} - f_2\right)$. Здесь используется $\hat{f}\psi_{f_2} = f_2\psi_{f_2}$. Из условия $\hat{P}(f_1)\psi_{f_1} = \psi_{f_1}$ получаем:

$$\hat{P}(f_1)\psi_{f_1} = a\left(\hat{f} - f_2\right)\psi_{f_1} = a(f_1 - f_2)\psi_{f_1} = \psi_{f_1} ,$$

и тогда $a = (f_1 - f_2)^{-1}$.

То есть, для N=2 получаем:

$$\hat{P}(f_1) = \frac{\hat{f} - f_2}{f_1 - f_2}, \qquad \hat{P}(f_2) = \frac{\hat{f} - f_1}{f_2 - f_1} ,$$

Аналогично и для произвольного N:

$$\hat{P}(f_i) = \prod_{k=1}^{N'} (f_i - f_k)^{-1} \left(\hat{f} - f_k\right) .$$

Собственные функции оператора $\hat{S}^2$ являются также и собственными функциями оператора $\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2$. Собственные значения $\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2$ равны -3 и $+1$. Поэтому

$$\hat{P}_{S=0} = \frac{1-\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2}{4}, \qquad \hat{P}_{S=1} = \frac{3+\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2}{4} .$$

Тема 6: N частиц со спином 1/2.

(5.27), (5.29), Доза: (5.26), (5.28), (5.30), (5.32).

****

(5.26)

Спины N частиц, равные n каждый, складываются в результирующий спин S=Ns. Каков суммарный спин любых 2,3, ….. , n частиц в указанном состоянии?

Спин таки равен *ns*.

****

(5.27)

Спиновая функция системы из N частиц со спином *s*=1/2 имеет вид

$$\Psi = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2 ..... \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_n \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_{n+1} .... \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_N .$$

Найти в указанном состоянии среднее значение квадрата суммарного спина системы частиц.

$$\vec{S}^2 = \frac{1}{4}\left(\sum_{a=1}^{N}\sigma_a\right)^2 = \frac{1}{4}\left(\sum_a \hat{\sigma}_a^2 + \sum_{a\neq b}\sigma_a\sigma_b\right)$$

$$\overline{\left(\sigma_a\right)_i} = \begin{cases} 0, & i = 1,2 \\ 1, & i = 3,\ a \le n \\ -1, & i = 3,\ a \ge n+1 \end{cases}$$

$$\vec{S}^2 = \frac{1}{4}\left\{N^2 - 4nN + 2N + 4n^2\right\}$$

****

(5.28)

В условии задачи (5.27) в частных случаях $n = 1$, $n = N-1$ найти вероятности различных значений величины S суммарного спина системы частиц.

Разделим систему на две части, каждая с проекциями спина в одну сторону. Суммарный спин будет пробегать значения от $\left|S_1 - S_2\right|$ до $S_1 + S_2$, поэтому при условии данной задачи он может принимать только два значения, $S = N/2$ и $S = (N-2)/2$. Вероятности их найдем, учитывая значение $\vec{S}^2$ из формулы . В обоих случаях, $n=1$ и $n = N-1$, получается

$$\overline{\vec{S}^2} = \frac{1}{4}\left(N^2 - 2N + 4\right).$$

С другой стороны, среднее определяется как сумма возможных значений с их вероятностями. Приравнивая это, получаем

$$\overline{\vec{S}^2} = \frac{1}{4}\left(N^2 - 2N + 4\right) = \frac{N}{2}\left(\frac{N}{2}+1\right)w_{N/2} + \frac{N-2}{2}\left(\frac{N-2}{2}+1\right)w_{N-2/2} =$$
$$= \frac{N}{2}\left(\frac{N}{2}+1\right)w_{N/2} + \frac{N-2}{2}\left(\frac{N-2}{2}+1\right)\left(1 - w_{N/2}\right) = \frac{1}{4}\left(N^2 - 2N + 4\right).$$

отсюда

$$w_{N/2} = \frac{1}{N}, \quad w_{(N-2)/2} = 1 - w_{N/2} = \frac{N-1}{N}.$$

****

(5.29)

Состояние частицы со спином *s*=1/2 характеризуется определенными значениями квантовых чисел l, m, s_z .Найти в указанном состоянии вероятности различных значений полного момента $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$ частицы.

-

$j = l \pm 1/2$

$$w(j = l + 1/2) = \frac{l + 2ms_z + 1}{2l+1}, \qquad w(j = l - 1/2) = \frac{l - 2ms_z}{2l+1}$$

****

(5.30)

Состояние некоторой системы характеризуется определенными значениями квантовых чисел J (момент системы) и $J_z = J$. Найти вероятности различных значений проекции момента J_n на ось, направление которой в пространстве определяется единичным вектором **n**.

-

Представим J_n как сумму $J_n = A \cdot \frac{1}{2} + B \cdot \left(-\frac{1}{2}\right)$, связанную с J.

$$J_n = (J + J_n) \cdot \frac{1}{2} + (J - J_n) \cdot \left(-\frac{1}{2}\right).$$

Фактически эта формула определяет количество частиц с проекциями на ось n, равными 1/2 и –1/2 при полной проекции, равной J_n.

Для одной частицы вероятность иметь проекцию на *n*, равную $1/2$ и $-1/2$, равна (см. более раннюю задачу)

$$w_{1/2} = \cos^2(\theta/2), \qquad w_{-1/2} = 1 - w_{1/2} = \sin^2(\theta/2).$$

Тогда для $J + J_n$ частиц с проекцией $1/2$ и $J - J_n$ частиц с проекцией $-1/2$:

$$w = \left(\cos^2(\theta/2)\right)^{J+J_n} \left(\sin^2(\theta/2)\right)^{J-J_n}.$$

Количество вариантов, которыми можо набрать $J + J_n$, равно как и $J - J_n$ из $2J$ частиц, равно $C_{2J}^{J+J_n}$. Тогда искомая вероятность равна

$$W(J_n) = C_{2J}^{J+J_n} \left(\cos^2(\theta/2)\right)^{J+J_n} \left(\sin^2(\theta/2)\right)^{J-J_n}.$$

****

(5.32)

Показать, что спиновая функция системы из *N* частиц со спином *s*=1/2, отвечающая состоянию с максимально возможным значением S=*N*/2 суммарного спина, симметрична по отношению к перестановке спиновых переменных любых двух частиц.

Имеют ли определенную симметрию спиновые функции, отвечающие другим значениям суммарного спина? Сравнить со случаем *N*=2.

-

При максимальном возможном значении спина $S = N/2$ спин любых двух частиц равен единице, $S = 1/2 + 1/2 = 1$. Поэтому спиновые функции этих частиц можно переставлять.
****

Тема 7: Спектральные термы атомов.

Для определения терма необходима информация о спине и орбитальном моменте незаполненной оболочки. Из их комбинации определяется также полный момент. В заполненных оболочках все моменты компенсируются, поэтому нет необходимости их рассматривать.
Запись терма имеет общую форму:

$$^{2S+1}L_J \,.$$

L – буква, соответствующая величине орбитального момента. Имеется соответствие названий термов величине L:

L	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Term	S	P	D	F	G	H	I	K	L	M	N

$2S+1$ определяется из спина, а J - полный момент.

J пробегает значения от $L+S$ до $|L-S|$. Поэтому уровень с определенными L и S расщепляется на
$2S+1$, $L>S$
$2L+1$, $L<S$

Для определения основного спектрального терма (терма с наименьшей энергией) необходимо сначала выписать электронную конфигурацию атома. Она выписывается с помощью данной таблицы:

$$\begin{array}{ccccccc}
1s^2 & 2s^2 & 3s^2 & 4s^2 & 5s^2 & 6s^2 & 7s^2 \\
 & 2p^6 & 3p^6 & 4p^6 & 5p^6 & 6p^6 & 7p^6 \\
 & & 3d^{10} & 4d^{10} & 5d^{10} & 6d^{10} & 7d^{10} \\
 & & & 4f^{14} & 5f^{14} & 6f^{14} & 7f^{14}
\end{array}$$

Подоболочки для заполнения берутся по диагоналям снизу вверх слева направо, *i.e.* полный порядок их заполнения такой:

$$1s^2 2s^2 2p^6 \underset{10}{|}\; 3s^2 3p^6 \underset{18}{|}\; 4s^2 3d^{10} 4p^6 \underset{36}{|}\; 5s^2 4d^{10} 5p^6 \underset{54}{|}\; 6s^2 4f^{14} \underset{70}{|}\; 5d^{10} 6p^6 \underset{86}{|}\; 7s^2 5f^{14} \underset{102}{|}\; 6d^{10} 7p^6$$

Таблица есть наглядная инструкция, реализующая ***правило Клечковского***. Оно формулируется так (не забываем, что оболочка с номером n может содержать n подоболочек):

Заполнение электронами орбиталей в атоме происходит в порядке возрастания суммы главного и орбитального квантовых чисел $n+l$. При одинаковой сумме раньше заполняется орбиталь с меньшим значением n.

В отдельном файле написаны электронные конфигурации атомов с атомным номером Z. Рассмотрены номера не выше 92.
Электронные конфигурации атомов с данными номерами отклоняются от тех, которые выписываются с помощью этой диагональной таблицы:
24 (Cr), 29 (Cu), 41, 42, 44, 45, 46, 47, 57, 58, 64, 78, 79, 89, 90, 91, 92
В частности:
24Cr $1s_2 2s_2 p_6 3s_2 p_6 \mathbf{d_5} 4\mathbf{s_1}$
29Cu $1s_2 2s_2 p_6 3s_2 p_6 d_{10} 4\mathbf{s_1}$

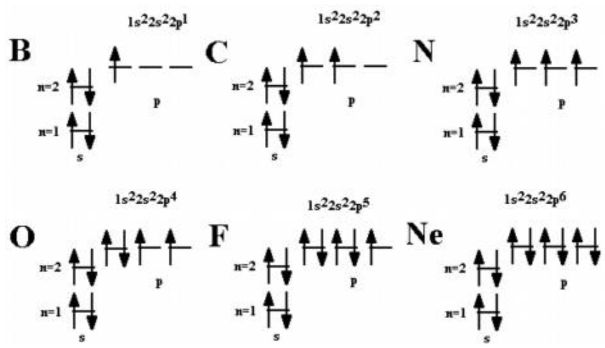
Для определения, какому из состояний соответствует меньшая энергия, используются **правила Хунда**:

Ты приглядись, решив присесть,
К местам трамвайного вагона:

Когда ряды пустые есть,
Подсаживаться нет резона.

А можно его и так выразить: наиболее выгодным состоянием будет такая ситуация в трамвае: вы хотите сидеть у окна – тогда у вас лучше настроение (спин вверх). Если все места у окна заняты – придется сесть не у окна – тогда настроение чуть хуже (спин вниз). Ну, и вы любите ездить поближе к кабине (больше значение орбитального момента), но это уже не так приоритетно, как сидеть у окна.

Стихотворение и картинка ниже – из Википедии.



Формулировка **правила Хунда**

Минимальной энергией данной электронной конфигурации обладает терм с наибольшим возможным значением спина и с наибольшим возможным при таком значении спина значении орбитального момента

На практике им пользоваться можно так: для незаполненной оболочки нарисовать все ячейки, в которых могут быть расположены электроны: количество ячеек 2L+1.В каждой ячейке по два места для электронов, с проекцией +1/2 и –1/2. В ячейках слева – проекция орбитального момента максимальна, справа – минимальна. Затем начать заполнять ячейки спинами $\uparrow \Leftrightarrow s=1/2$ по одному в ячейке, пока не кончатся электроны или свободные ячейки. Затем только начать заполнять ячейки спинами $\downarrow \Leftrightarrow s=-1/2$, начав с той же стороны, с которой начиналось заполнение спинами $\uparrow$, в данном случае – слева

Полный момент определяется так:

$J=|L-S|$ - в случае, когда подоболочка заполнена менее чем наполовину

$J=L+S$ - в случае, когда подоболочка заполнена более или точно наполовину.

Точно наполовину $\Leftrightarrow L=0$

В каждой оболочке, согласно принципу Паули, могут находиться $2(2L+1)$ электронов.

Z	H^1	He^2	Li^3	Be^4	B^5	C^6	N^7	O^8	F^9	Ne^{10}
Term	${}^2S_{1/2}$	${}^1S_0$	${}^2S_{1/2}$	${}^1S_0$	${}^2P_{1/2}$	${}^3P_0$	${}^4S_{3/2}$	${}^3P_2$	${}^2P_{3/2}$	${}^1S_0$
*	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*
Z	Na^{11}	Mg^{12}	Al^{13}	Si^{14}	P^{15}	S^{16}	Cl^{17}	Ar^{18}		
Term	${}^2S_{1/2}$	${}^1S_0$	${}^2P_{1/2}$	${}^3P_0$	${}^4S_{3/2}$	${}^3P_2$	${}^2P_{1/2}$	${}^1S_0$		

При Z>18 имеют место немного иные заполнения оболочек. Тогда получается:

$K^{19}: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$ $\quad {}^2S_{1/2}$

$Ca^{20}: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$ $\quad {}^1S_0$

$Sc^{21}: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2$ $\quad {}^2D_{3/2}$

$Ti^{22}: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^2 4s^2$ $\quad {}^3F_2$

****

(11.19) Найти возможные термы возбужденных состояний атома с электронной конфигурацией сверх заполненных оболочек, $n \neq n'$.

а) $nsn'p$, б) $npn'p$, в) $npn'd$.

$$\overline{r^n} = \int r^n w(r)\, d^3 r ,$$

****

(11.20) Найти возможные термы атома со следующей электронной конфигурацией сверх заполненных оболочек.

а) $(np)^2$, б) $(np)^3$, в) $(np)^4$, в) $(nd)^2$.

а) $(np)^2$

	$m=+1$	$m=0$	$m=-1$
$s_z=+1/2$			
$s_z=-1/2$			

нарисуем табличку

согласно принципу Паули, в каждой из ячеек этой таблицы может находиться не более одного электрона. Всего количество вариантов равно $C_6^2 = \dfrac{6!}{2!\cdot(6-2)!} = \dfrac{4!\cdot 5\cdot 6}{2\cdot 4!} = 15$

Будем выписывать, сколькими вариантами может реализоваться то или иное состояние. Первым числом в скобках записывается суммарная проекция орбитального момента, а вторым – суммарная проекция спина:

	(2,0): ✓	
(1,1): ✓	(1,0): ✓✓	(1,–1): ✓
(0,1): ✓	(0,0): ✓✓✓	(0,–1): ✓
(–1,1): ✓	(–1,0): ✓✓	(–1,–1): ✓
	(–2,0): ✓	

Всего 15 галочек, что действительно соответствует общему количеству вариантов. Попытаемся определить, каким термам соответствуют эти состояния.

Терму с определенным значением орбитального момента и спина соответствуют состояния со всеми возможными проекциями этого момента и спина. Поэтому начнем искать термы с состояния с максимальным моментом и при этом с максимальным спином.

Состояние (2,0): терм ${}^1D$. Этому терму соответствуют 5 состояний (2,0), (1,0), (0,0), (–1,0), (–2,0). Убираем по одной галочке с этих состояний.

Рассмотрим теперь состояние (1,1): терм ${}^3P$. Ему соответствуют 9 состояний с $m=-1...+1$ и проекцией спина $s_z=-1...+1$. Убираем и соответствующие им 9 галочек. Остается незадействованным только одно состояние: (0,0). Это состояние терма ${}^1S$.

Для системы из 2 эквивалентных *p*- электронов возможны термы ${}^1D$, ${}^3P$, ${}^1S$.

б) $(np)^3$

	$m=+1$	$m=0$	$m=-1$
$s_z=+1/2$			
$s_z=-1/2$			

нарисуем табличку

согласно принципу Паули, в каждой из ячеек этой таблицы может находиться не более одного электрона. Всего количество вариантов равно $C_6^3 = \frac{6!}{3!\cdot(6-3)!} = \frac{3!\cdot 4\cdot 5\cdot 6}{3!\cdot 3!} = 20$.
Аналогично случаю а), перечислим эти состояния.

(2,1/2): ✓ (2,–1/2): ✓
(1, 1/2): ✓✓ (1,–1/2): ✓✓
(0,3/2): ✓ (0, 1/2): ✓✓✓ (0,–1/2): ✓✓✓ (0,– 3/2): ✓
(–1, 1/2): ✓✓ (–1,–1/2): ✓✓
(–2, 1/2): ✓ (–2,–1/2): ✓

Рассмотрим состояние с наибольшей проекцией момента (2,1/2). Это состояние терма ${}^2D$.
Этому терму соответствуют 10 состояний:
(2,1/2), (2,–1/2), (1,1/2), (1,–1/2), (0,1/2), (0, –1/2), (–1,1/2), (–1, –1/2), (–2, –1/2), (–2, –1/2).
Есть еще одно состояние (1, 1/2), не задействованное этим термом. Оно соответствует терму ${}^2P$. К этому терму также относятся 6 состояний:
(1,1/2), (1,–1/2), (0,1/2), (0, –1/2), (–1,1/2), (–1, –1/2).
Есть состояние (0,3/2), не использованное двумя предыдущими термами. Таким образом, это состояние терма ${}^4S$. К этому терму также относятся 4 состояния:
(0,3/2), (0,1/2), (0, –1/2), (0,–3/2).
Таким образом, перебраны все 20 состояний.
Для системы из 3 эквивалентных *p*- электронов возможны термы ${}^2D$, ${}^2P$, ${}^4S$.

в) $\left(np\right)^4$

в этом случае 6 мест заполняются 4 электронами. Можно сказать и так, что меняют положение 2 дырки. Одна дырка с некоторыми проекциями момента и спина соответствует одному электрону с противоположными им проекциями. Поэтому случаю $\left(np\right)^4$ соответствуют те же состояния, что и случаю $\left(np\right)^2$.

	$m=+1$	$m=0$	$m=-1$
$s_z=+1/2$			
$s_z=-1/2$			

Нарисуем табличку

согласно принципу Паули, в каждой из ячеек этой таблицы может находиться не более одного электрона (или одной дырки). Всего количество вариантов равно $C_6^4=\frac{6!}{4!\cdot\left(6-4\right)!}=\frac{4!\cdot 5\cdot 6}{4!\cdot 2!}=15=C_6^2$

Будем выписывать, сколькими вариантами может реализоваться то или иное состояние. Первым числом в скобках записывается суммарная проекция орбитального момента, а вторым – суммарная проекция спина:

(2,0): ✓
(1,1): ✓ (1,0): ✓✓ (1,–1): ✓
(0,1): ✓ (0,0): ✓✓✓ (0,–1): ✓
(–1,1): ✓ (–1,0): ✓✓ (–1,–1): ✓
(–2,0): ✓

Всего 15 галочек, что действительно соответствует общему количеству вариантов. Попытаемся определить, каким термам соответствуют эти состояния.
Терму с определенным значением орбитального момента и спина соответствуют состояния со всеми возможными проекциями этого момента и спина. Поэтому начнем искать термы с максимального момента и спина.
Состояние (2,0): терм ${}^1D$. Этому терму соответствуют 5 состояний
(2,0), (1,0), (0,0), (–1,0), (–2,0). Убираем по одной галочке с этих состояний.

Рассмотрим теперь состояние (1,1): терм ${}^3P$. Ему соответствуют 9 состояний с $m = -1...+1$ и проекцией спина $s_z = -1...+1$. Убираем и соответствующие им 9 галочек. Остается незадействованным только одно состояние: (0,0). Это состояние терма ${}^1S$.

Для системы из 4 эквивалентных *p*- электронов возможны термы ${}^1D$, ${}^3P$, ${}^1S$.

Тема 8: Четность и спектральные термы атомов.

****

(11.22) Какова четность атомных термов, имеющих электронную конфигурацию сверх заполненных оболочек:

а) ns^k , б) np^k , в) nd^k , г) $np^k nd^i$?

-

Четность определяется только орбитальным моментом: четность одной частицы равна

$$I = \left(-1\right)^l .$$

Четность системы частиц равна произведению четностей частей, ее составляющих.
Поэтому

а) ns^k

$$I = \left(\left(-1\right)^0\right)^k = 1 .$$

б) np^k

$$I = \left(\left(-1\right)^1\right)^k = \left(-1\right)^k .$$

в) nd^k

$$I = \left(\left(-1\right)^2\right)^k = 1 .$$

г) $np^k nd^i$

$$I = \left(\left(-1\right)^1\right)^k \left(\left(-1\right)^2\right)^i = \left(-1\right)^k .$$

****

(11.23) Указать атомные термы, возможные для электронной конфигурации nl^2 .

-

Волновая функция может быть разделена на координатную и спиновую части, если пренебречь релятивистскими эффектами, и в отсутствие внешних полей. Она имеет вид

$$\Psi\left(x_1, x_2\right) = \phi\left(\vec{r}_1, \vec{r}_2\right) \cdot \chi\left(s_1, s_2\right) ,$$

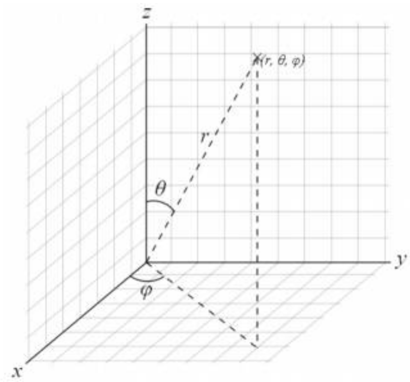
В свою очередь, в сферической системе отсчета координатная часть имеет вид

$$\phi\left(\vec{r}_1, \vec{r}_2\right) = R\left(r\right) \cdot Y\left(\vartheta, \varphi\right) ,$$

причем угловая часть (собств. функция момента) пропорциональна такой комбинации:

$$P_l^m\left(\cos\vartheta\right) e^{im\varphi} ,$$

Волновая функция двух электронов = фермионов обязана быть антисимметричной относительно перестановки их местами. Эта перестановка означает то, что происходит инверсия системы координат (центр ее находится посередине между двумя электронами). В сферических координатах это соответствует преобразованию (см. картинку)



$$r \to r, \qquad \vartheta \to \pi - \vartheta, \qquad \varphi \to \varphi + \pi,$$

а отсюда следует

$$\cos\vartheta \to \cos(\pi - \vartheta) = -\cos\vartheta, \qquad e^{im\varphi} \to e^{im(\varphi+\pi)} = (-1)^m e^{im\varphi}.$$

Из свойств присоединенных полиномов Лежандра следует

$$P_l^m(-\cos\vartheta) = (-1)^{l-m} P_l^m(\cos\vartheta).$$

Таким образом, перемена местами двух электронов $(\vec{r} \to -\vec{r})$ влечет за собой изменения

$$R(r)\cdot Y(\vartheta,\varphi) \to R(r)\cdot(-1)^{l-m}(-1)^m Y(\vartheta,\varphi) = (-1)^l R(r) Y(\vartheta,\varphi),$$

или

$$\phi \to (-1)^l \phi.$$

Величина

$$I = (-1)^l.$$

называется *четностью* состояния.

Спиновая функция симметрична при суммарном спине $S=1$ $(\uparrow\uparrow)$ и антисимметрична при $S=0$ $(\uparrow\downarrow)$. Таким образом, суммарный спин и суммарный орбитальный момент связаны друг с другом таким образом, что их взаимоотношение определяет возможные состояния, исходя из необходимости антисимметричности полной волновой функции двух фермионов.

Тогда при $S=1$ спиновая часть в.ф. симметрична, и координатная часть должна быть антисимметричной. Это достигается при нечетном значении момента. Наоборот, при $S=0$ спиновая часть антисимметрична, и координатная часть должна быть симметричной. То есть, в таком случае момент должен быть четным.

Итак, если оба момента равны l, то

$$\begin{aligned} S=1 \quad &\Rightarrow \quad L = 2l-1, 2l-3, ..., 1 \\ S=0 \quad &\Rightarrow \quad L = 2l, 2l-2, ..., 0 \end{aligned}.$$

****

(11.24) Каковы мультиплетность $2S+1$ и полный орбитальный момент L основного состояния атома с электронной конфигурацией nl^k сверх заполненныхъ оболочекъ?

-

Рассмотрим сначала случай, при котором оболочка заполнена менее чем наполовину.

Спин тогда равен сумме спинов.

$$S_{\max} = S_{z\max} = k/2.$$

Момент равен сумме максимально возможных в этом случае проекций момента.

$$L_{\max} = (L_z)_{\max} = l + (l-1) + (l-2) + ... + (l-k+1).$$

Сумма чисел по порядку от j до m является суммой арифметической прогрессии; она равна

$$\sum_{i=j}^{m} i = \frac{1}{2}(m+j)(m-j+1),$$

В данном случае,

$$L_{\max} = \sum_{i=l-k+1}^{l} i = \frac{1}{2}\left(l+(l-k+1)\right)\left(l-(l-k+1)+1\right) = \frac{k}{2}(2l-k+1),$$

Полный момент основного состояния равен

$$J = \left|L_{\max} - S_{\max}\right| = \left|\frac{k}{2}(2l-k+1) - \frac{k}{2}\right| = \left|\frac{k}{2}(2l-k+1-1)\right| = \left|\frac{k}{2}(2l-k)\right|,$$

Оболочка заполнена более чем наполовину: в нижнем ряду число электронов равно $k-(2l+1)$. Это означает, что спин определяется количеством дырок,

$$S_{\max} = S_{z\max} = \frac{1}{2}\cdot\left[2l+1-\left(k-(2l+1)\right)\right] = \frac{1}{2}\cdot\left[2(2l+1)-k\right].$$

То есть, эквивалентен спину $\left[2(2l+1)-k\right]$ электронов.

Орбитальный момент равен орбитальному моменту электронов, число которых равно разности всех k электронов и количества электронов в половине оболочки, то есть число таких электронов равно $k_{eff} = k-(2l+1) = k-2l-1$.

$$L_{\max} = \sum_{i=l-k_{eff}+1}^{l} i = \frac{k_{eff}}{2}\left(2l-k_{eff}+1\right) = \frac{(k-2l-1)}{2}\left(2l-(k-2l-1)+1\right) = \\ = \frac{1}{2}(k-2l-1)\left(2(2l+1)-k\right).$$

Этот же результат можно получить, если взять k_{eff}, равный числу электронов, фигурирующему при определении спина, $k_{eff} = 2(2l+1)-k$:

$$L_{\max} = \sum_{i=l-k_{eff}+1}^{l} i = \frac{k_{eff}}{2}\left(2l-k_{eff}+1\right) = \frac{\left(2(2l+1)-k\right)}{2}\left(2l-\left(2(2l+1)-k\right)+1\right) = \\ = \frac{1}{2}\left(2(2l+1)-k\right)\left(k+2l+1-2(2l+1)\right) = \frac{1}{2}\left(2(2l+1)-k\right)(k-2l-1).$$

Полный момент равен

$$J = L_{\max} + S_{\max} = \frac{1}{2}(k-2l-1)\left(2(2l+1)-k\right) + \frac{1}{2}\cdot\left(2(2l+1)-k\right) = \\ = \frac{1}{2}\cdot\left(2(2l+1)-k\right)\cdot(k-2l-1+1) = \frac{1}{2}\cdot\left(2(2l+1)-k\right)\cdot(k-2l).$$

****

(11.25) Каково число различных независимых состояний (не термов) атома, отвечающих электронной конфигурации nl^k сверх заполненных оболочек?

-

Для первого электрона число возможных состояний будет равно $2(2l+1)$. Для k электронов это число окажется равным

$$N = C_{2(2l+1)}^{k} = \frac{2(2l+1)!}{k!(2(2l+1)-k)!}.$$

Тема 9: Модель Томаса-Ферми.

$$dN = 2\frac{d^3p\,d^3r}{(2\pi\hbar)^3}$$

$$dN = \frac{2d^3r}{(2\pi\hbar)^3}\int\limits_{p\le p_0(\vec r)} d^3p = \frac{8\pi p_0^3(\vec r)\,d^3r}{3(2\pi\hbar)^3}$$

$$dN = n(\vec r)\,d^3r$$

$$n(\vec r) = \frac{p_0^3(r)}{3\pi^2\hbar^3}$$

$$\frac{p_0^2(\vec r)}{2m} - e\varphi(\vec r) = -e\varphi_0$$

$$p_0(\vec r) = \sqrt{2me(\varphi(\vec r)-\varphi_0)} \equiv \sqrt{2me\cdot\delta\varphi(\vec r)}$$

$$n(\vec r) = \frac{(2me\cdot\delta\varphi(\vec r))^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3}$$

С другой стороны, уравнение Пуассона $\Delta E = -4\pi\rho$ здесь записывается в виде [$\rho(\vec r) = -en(\vec r),\quad e>0$]

$$\Delta(\delta\varphi(\vec r)) = 4\pi en(\vec r)$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)(\varphi(r)-\varphi_0) = \frac{4e}{3\pi\hbar^3}\left(2me(\varphi(r)-\varphi_0)\right)^{3/2}$$

$$\boxed{r = bZ^{-1/3}x,\qquad x = \frac{Z^{1/3}}{b}r,\qquad b = \frac{1}{2}\frac{\hbar^2}{me^2}\left(\frac{3\pi}{4}\right)^{2/3} \equiv \frac{a_0}{2}\left(\frac{3\pi}{4}\right)^{2/3}},$$

где

$$\boxed{\frac{\hbar^2}{me^2} \equiv a_0}$$

есть первый Боровский радиус.

$$e(\varphi(r)-\varphi_0) \equiv \frac{Ze^2}{r}\Phi(x)$$

$$\sqrt{x}\Phi''(x) = \Phi^{3/2}(x)$$

$$\lim_{r\to 0}(r\varphi(r)) = Ze,\qquad \lim_{r\to\infty}(r\varphi(r)) = 0$$

$$\Phi(0) = 1,\qquad \Phi(\infty) = 0$$

Уравнение Томаса-Ферми не имеет решения в элементарных функциях, но оно может быть аппроксимировано. Для $n(r)$ имеется аппроксимация

$$n(r) = \frac{Z}{16\pi}\left(\frac{\lambda}{r}\right)^{3/2} e^{-\sqrt{\lambda r}},$$

где

$$\lambda = \frac{175}{18}\left(\frac{2}{3\pi}\right)^{2/3}\frac{Z^{1/3}}{a_0}.$$

****

(11.29) Используя выражение для электронной плотности нейтрального атома согласно модели Томаса-Ферми, найти зависимость от Z среднего расстояния электрона от ядра и среднего значения квадрата этой величины. Каково значение $\overline{r^n}$ для $n \geq 3$?

-

Среднее значение $\overline{r^n}$ определяется как

$$\boxed{\overline{r^n} = \frac{\int r^n n(r)\, d^3r}{\int n(r)\, d^3r}}\ .$$

Знаменатель в этой формуле определяет нормировку (интеграл в знаменателе равен *Z*).

$$n(r) = \frac{\left(2m\dfrac{Ze^2}{r}\Phi\right)^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3} = \frac{1}{3\pi^2\hbar^3}\left(2m\frac{Z^{4/3}e^2}{b}\right)^{3/2}\left(\frac{\Phi}{x}\right)^{3/2} =$$

$$= \frac{32m^3e^6Z^2}{9\pi^3\hbar^6}\left(\frac{\Phi(x)}{x}\right)^{3/2} = \frac{32Z^2}{9\pi^3}\cdot\frac{1}{a_0^3}\left(\frac{\Phi(x)}{x}\right)^{3/2},$$

$$x = \frac{Z^{1/3}}{b}r, \qquad b = \frac{a_0}{2}\left(\frac{3\pi}{4}\right)^{2/3}$$

.

Подставляем $n(r)$ в . Учтем, что r связан с x по .

$$\overline{r^n} = \frac{1}{Z}\int r^n n(r)\, d^3r = \frac{4\pi}{Z}\int r^{n+2} n(r)\, dr = \frac{4\pi}{Z} b^{3+n} Z^{-\frac{3+n}{3}} \int x^{n+2} n(x)\, dx =$$

$$= \frac{4\pi}{Z} b^{3+n} Z^{-\frac{3+n}{3}} \frac{32Z^2}{9\pi^3 a_0^3} \int x^{n+2}\left(\frac{\Phi(x)}{x}\right)^{3/2} dx$$

Посчитаем множитель $4\pi \cdot b^{3+n}\dfrac{32}{9\pi^3 a_0^3}$:

$$4\pi \cdot b^{3+n}\frac{32}{9\pi^3 a_0^3} = \frac{\cancel{128}}{\cancel{9\pi^2}\cancel{a_0^3}}\cdot\frac{\cancel{a_0^3}}{\cancel{2^3}}\left(\frac{\cancel{3\pi}}{\cancel{4}}\right)^2\cdot\frac{a_0^n}{2^n}\left(\frac{3\pi}{4}\right)^{2n/3} = b^n\ .$$

Таким образом,

$$\overline{r^n} = Z^{-n/3}\cdot b^n \int_0^\infty x^{n+2}\left(\frac{\Phi(x)}{x}\right)^{3/2} dx$$

Нужно обратить внимание, что

$$n \geq 3: \qquad \overline{r^n} = \infty\ .$$

На экзамене достаточно представить ответ в виде . Можно, однако, оценить среднее значение $\overline{r}$ через аппроксимацию $n(r)$ (см.).

$$\overline{r} = \frac{1}{Z}\int r\cdot n(r)\,d^3r \approx \frac{1}{Z}\int_0^\infty r\cdot\frac{Z}{16\pi}\left(\frac{\lambda}{r}\right)^{3/2} e^{-\sqrt{\lambda r}}\cdot 4\pi\cdot r^2dr =$$

$$= \frac{1}{Z}\frac{Z}{4}\lambda^{3/2}\int_0^\infty dr\cdot r^3\cdot\left(\frac{1}{r}\right)^{3/2} e^{-\sqrt{\lambda r}} = \frac{\lambda^{3/2}}{4}\int_0^\infty dr\cdot r^{3/2}e^{-\sqrt{\lambda r}} =$$

$$= \left\{\begin{aligned} & x = \sqrt{\lambda r},\quad r = x^2/\lambda,\quad dr = 2xdx/\lambda \\ & r^{3/2}dr = 2x^4dx/\lambda^{5/2} \end{aligned}\right\} = \frac{2\lambda^{3/2}}{4\lambda^{5/2}}\int_0^\infty dx\cdot x^4e^{-x} = \frac{1}{2\lambda}\int_0^\infty dx\cdot x^4e^{-x}$$

$$\left\{\begin{aligned} & \int_0^\infty dx\cdot x^n e^{-x} = -\int_0^\infty x^n de^{-x} = -\left(\cancel{x^n e^{-x}\Big|_0^\infty} - n\int_0^\infty e^{-x}x^{n-1}dx\right) = n\int_0^\infty x^{n-1}e^{-x}dx \\ & \int_0^\infty dx\cdot x^n e^{-x} = n\int_0^\infty dx\cdot x^{n-1}e^{-x} = n\cdot(n-1)\int_0^\infty dx\cdot x^{n-2}e^{-x} = \\ & = \ldots\ldots = n\cdot(n-1)\ldots\cdot 2\cdot 1\cdot\int_0^\infty dx\cdot e^{-x} = n! \end{aligned}\right\}$$

$$\overline{r} = \frac{1}{2\lambda}\cdot 4! = \frac{12}{\lambda} = 12\cdot\frac{18}{175}\cdot\left(\frac{3\pi}{2}\right)^{2/3}\cdot\frac{a_0}{Z^{1/3}} = \frac{216}{175}\left(\frac{3\pi}{2}\right)^{2/3}\frac{a_0}{Z^{1/3}} \approx$$

$$\approx 2.8108\cdot 1.234\frac{a_0}{Z^{1/3}} \approx \frac{1.494}{Z^{1/3}}a_0$$

****

(11.30) Найти распределение электронов по импульсам в нейтральном атоме с зарядом ядра Z согласно модели Томаса-Ферми. Учесть, что универсальная функция $\Phi(x)$ этой модели, определяющая объемную плотность электронов, монотонно убывает с ростом x. Используя полученный результат, найти зависимость от заряда ядра Z средних величин импульса и кинетической энергии электрона.

-

Задача аналогична предыдущей, только теперь необходимо распределение не по координатам, а по импульсам:

$$\overline{p^n} = \frac{\int p^n n(p)\,d^3p}{\int n(p)\,d^3p} = \frac{1}{Z}\int p^n n(p)\,d^3p\,.$$

Посмотрим для этого, как начинается вывод формул модели Томаса-Ферми.
Число состояний равно

$$\Delta N = \frac{2\Delta\Gamma}{(2\pi\hbar)^3} = 2\frac{\Delta V_p\Delta V_q}{(2\pi\hbar)^3}\,.$$

ΔN может быть выражен в виде

$$\Delta N = 2\frac{\Delta V_q}{(2\pi\hbar)^3}d^3p\,.$$

Таким образом, необходимо выразить через импульсы элемент объема в координатном пространстве. ΔV_q – объем, в котором электроны могут иметь импульс p. $\Delta V_p = d^3 p$ – число электронов, импульс которых заключен в соответствующем интервале $d^3 p$.

Нам известна математическая функция $\Phi(x)$, хоть и не в явном виде. Значит, можно считать известной и $\Phi(x)/x$. Определив $f(x) \equiv \Phi(x)/x$, можно находить x как обратную функцию от $f(x)$ (как известно, x здесь – безразмерная переменная, пропорциональная радиусу). В условии предлагается воспользоваться монотонностью функции $\Phi(x)$. Действительно, из монотонности $\Phi(x)$ следует взаимно однозначное соответствие $\Phi(x)/x$ и x.

Выразим $\dfrac{\Phi(x)}{x}$ из , подставив $e(\varphi(r)-\varphi_0)$ из . b определено в :

$$\frac{\Phi(x)}{x} \equiv f(x) = \frac{b \cdot p_0^2}{2mZ^{4/3}e^2} = \frac{p_0^2}{2mZ^{4/3}e^2} \cdot \frac{a_0}{2}\left(\frac{3\pi}{4}\right)^{2/3} = \frac{p_0^2 a_0^2}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{4Z^{4/3}} \cdot \left(\frac{3\pi}{4}\right)^{2/3} =$$
$$= \left(\frac{p_0^2 a_0^2}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{4Z^{4/3}} \cdot \frac{3\pi}{4}\right)^{2/3} = \left(\frac{p_0^3 a_0^3}{\hbar^3} \cdot \frac{1}{8Z^2} \cdot \frac{3\pi}{4}\right)^{2/3} = \left(\frac{3\pi}{32Z^2} \cdot \frac{p_0^3 a_0^3}{\hbar^3}\right)^{2/3} \equiv u_0^{2/3} \equiv y.$$

$$x = f^{-1}(y) \equiv g(y).$$

Таким образом, мы ввели функцию $g(y)$, которая является обратной к функции $f(x)$. Введем константу q с размерностью импульса

$$q \equiv \frac{\hbar}{a_0}.$$

Тогда u имеет вид

$$u = \frac{3\pi}{32Z^2} \cdot \frac{p_0^3}{q^3}.$$

$$\Delta V_q = \frac{4}{3}\pi r^3 = \frac{4\pi b^3}{3Z} x^3(p) = \frac{4\pi b^3}{3Z} g^3\left[\left(\frac{3\pi}{32Z^2} \cdot \frac{p_0^3}{q^3}\right)^{2/3}\right] = \frac{4\pi b^3}{3Z} g^3\left(u^{2/3}\right) =$$
$$= \frac{4\pi}{3Z} \cdot \frac{a_0^3}{8} \frac{9\pi^2}{16} \cdot g^3\left(u^{2/3}\right) = \frac{3\pi^3 a_0^3}{32Z} \cdot g^3\left(u^{2/3}\right).$$

Подставляем полученное выражение для ΔV_q в :

$$\Delta N = n(p)\, d^3 p = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \Delta V_q d^3 p = \frac{2}{8\pi^3 \hbar^3} \frac{3\pi^3 a_0^3}{32Z} \cdot g^3\left(u^{2/3}\right) d^3 p =$$
$$= \frac{3}{128Z} \frac{1}{q^3} \cdot g^3\left(u^{2/3}\right) d^3 p.$$

Мы будем считать интегралы, в которых g является функцией u. Поэтому нужно перейти к переменной интегрирования u.

$$\frac{3\pi}{32Z^2}\frac{p^3}{q^3} \equiv u, \quad p = \left(\frac{32Z^2}{3\pi}\right)^{1/3} q \cdot u^{1/3},$$

$$dp = \left(\frac{32Z^2}{3\pi}\right)^{1/3} q \frac{u^{-2/3}}{3} du, \quad p^2 dp = \frac{32Z^2}{9\pi} q^3 du$$

Перепишем комбинацию $n(p)\, d^3 p$ в терминах новой переменной интегрирования:

$$n(p) \cdot d^3 p = \frac{3}{128Z}\frac{1}{q^3} \cdot g^3\left(u^{2/3}\right) \cdot 4\pi p^2 dp = \frac{3\pi}{32Z}\frac{1}{q^3} \cdot g^3\left(u^{2/3}\right) p^2 dp =$$

$$= \frac{3\pi}{32Z}\frac{1}{q^3} \cdot g^3\left(u^{2/3}\right) \frac{32Z^2}{9\pi} q^3 du = \frac{Z}{3} g^3\left(u^{2/3}\right) du$$

Теперь можно посчитать среднее $\overline{p^n}$:

$$\overline{p^n} = \frac{\int p^n \cdot n(p)\, d^3 p}{\int n(p)\, d^3 p} = \frac{1}{Z}\int p^n \cdot n(p)\, d^3 p = \frac{1}{Z}\int p^n \cdot \frac{Z}{3} g^3\left(u^{2/3}\right) du =$$

$$\int_0^\infty \left(\frac{32Z^2}{3\pi}\right)^{n/3} q^n \cdot u^{n/3} \frac{1}{3} g^3\left(u^{2/3}\right) du = \frac{1}{3} q^n \left(\frac{32Z^2}{3\pi}\right)^{n/3} \int_0^\infty \cdot u^{n/3} g^3\left(u^{2/3}\right) du =$$

$$= q^n Z^{2n/3} \frac{1}{3}\left(\frac{32}{3\pi}\right)^{n/3} \int_0^\infty \cdot u^{n/3} g^3\left(u^{2/3}\right) du$$

Необходимо заметить, что в полученной формуле единственным размерным множителем является $q^n = \left(\hbar/a_0\right)^n$, а зависимость от Z выражается в виде одного общего множителя $Z^{2n/3}$.

Задачи на определение среднего значения кинетической энергии $E = \frac{p^2}{2m}$, среднего момента $l \propto r \cdot p$ и т.д. решаются путем усреднения p в соответствующей степени по образцу данной задачи.

Тема 10: Модель Томаса-Ферми.

****

(11.31) В рамках модели Томаса-Ферми для нейтрального атома найти зависимость от заряда ядра Z:
а) характерной величины орбитального момента электрона.
б) энергии полной ионизации атома.

-

$$\bar{r} \propto Z^{-1/3}, \qquad \bar{p} \propto Z^{2/3}.$$

$$l \propto r_{char} p_{char} \propto Z^{1/3}.$$

Энергия полной ионизации – это полная энергия атома с противоположным знаком.

$$U_{en} \propto -Z \cdot \frac{Z}{r} \propto -Z^{7/3}.$$

$$U_{ee} \propto -Z\left(Z-1\right) \cdot \frac{1}{r} \propto Z^2 \cdot Z^{1/3} = Z^{7/3}.$$

$$E_{ion} = -\left(U_{ee} + U_{en}\right) \propto Z^{7/3}.$$

****

(11.33) В модели Томаса-Ферми для нейтрального атома выразить через электронную плотность $n\left(r\right)$ кинетическую энергию электронов, энергию их взаимодействия друг с другом (U_{ee}) и с ядром (U_{en}).
Используя полученные выражения, теорему вириала и поведение на малых расстояниях $r \to 0$ электростатического потенциала самосогласованного поля электронов и ядра

$$\varphi\left(r\right) \approx \frac{Z}{r} - 1{,}80 Z^{4/3},$$

получить численное значение энергии полной ионизации атома.

-

$$T_{\max} = \frac{1}{2m}\left(3\pi^2 \hbar^3 n\left(r\right)\right)^{2/3}.$$

Узнаем, как связана средняя кинетическая энергия с максимальной.

$$dN = 2\frac{d^3 p d^3 r}{\left(2\pi\hbar\right)^3}$$

$$n\left(\vec{r}\right) = \frac{p_0^3\left(r\right)}{3\pi^2\hbar^3}$$

$$\overline{T} = \int\int_0^{p_0} \frac{p^2}{2m} \cdot 2 \cdot \frac{4\pi p^2 dp d^3r}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{4\pi}{m(2\pi\hbar)^3}\int \frac{1}{5} p_0^5(r)\, d^3r =$$

$$= \frac{4\pi}{5m(2\pi\hbar)^3}\int\left(3\pi^2\hbar^3 n(r)\right)^{5/3} d^3r =$$

$$= \frac{4\pi}{5m(2\pi\hbar)^3}\int\left(3\pi^2\hbar^3 n(r)\right)^{3/3}\left(3\pi^2\hbar^3 n(r)\right)^{2/3} d^3r = \frac{4\pi 3\pi^2\hbar^3}{5m(2\pi\hbar)^3}\int n(r)\, p_0^2 d^3r = .$$

$$= \frac{3}{5\cdot 2m} p_0^2 = \frac{1}{2m}\cdot\frac{3}{5} p_0^2 = \frac{3\left(3\pi^2\hbar^3\right)^{2/3}}{10m}\int n(r)^{5/3} d^3r$$

$$U_{en} = -Ze^2\int\frac{n}{r} d^3r .$$

$$U_{ee} = \frac{Z}{2}\int\frac{n(r)}{r} d^3r - \frac{\left(3\pi^2\hbar^3\right)^{2/3}}{4}\int n^{5/3} d^3r \cdot$$

$$\frac{10}{3}\overline{T} = \left(3\pi^2\hbar^3\right)^{2/3}\int n(r)^{5/3} d^3r$$

$$U_{ee} = -\frac{U_{en}}{2} - \frac{10}{3\cdot 4}\overline{T} .$$

$$U = U_{ee} + U_{en} .$$

$$2\overline{T} = -U = -U_{ee} - U_{en} .$$

$$U_{ee} = -\frac{U_{en}}{2} - \frac{5}{6}\overline{T} = -\frac{U_{en}}{2} - \frac{5}{12}\left(-U_{ee} - U_{en}\right) = -\frac{U_{en}}{2} + \frac{5}{12}U_{ee} + \frac{5}{12}U_{en} =$$

$$= -\frac{U_{en}}{12} + \frac{5}{12}U_{ee} .$$

$$\frac{7}{12}U_{ee} = -\frac{U_{en}}{12}$$

$$7U_{ee} = -U_{en}$$

11.34

$$U_{en} = -Ze^2\int\frac{n}{r} d^3r .$$

$$U_{ee} = \frac{1}{2}\int\int\frac{n(r)\,n(r')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r d^3r' .$$

$$\overline{T} = \frac{3\left(3\pi^2\hbar^3\right)^{2/3}}{10m}\int n(r)^{5/3} d^3r \cdot$$

$$E = \overline{T} + U_{en} + U_{ee} .$$

$$E = \frac{3\left(3\pi^2\hbar^3\right)^{2/3}}{10m}\int n(r)^{5/3} d^3r - Ze^2\int\frac{n}{r} d^3r + \frac{1}{2}\int\int\frac{n(r)\,n(r')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r d^3r' \cdot$$

$$\delta E = \int \delta n(r) \left\{ \frac{\left(3\pi^2\right)^{2/3}}{2} n(r)^{2/3} - \frac{Z}{r} + \frac{1}{2} \int \frac{n(r')}{|\vec{r} - \vec{r}\,'|} d^3 r' \right\} d^3 r \, .$$

$$\frac{\left(3\pi^2\right)^{2/3}}{2} n(r)^{2/3} - \frac{Z}{r} + \frac{1}{2} \int \frac{n(r')}{|\vec{r} - \vec{r}\,'|} d^3 r' = 0 \cdot$$

$$\Delta \frac{1}{|r - r'|} = -4\pi \delta\left(\vec{r} - \vec{r}\,'\right) .$$

$$\Delta \left[\frac{\left(3\pi^2\right)^{2/3}}{2} n(r)^{2/3} - \frac{Z}{r} \right] = -4\pi \left[Z\delta\left(\vec{r}\right) - n\left(\vec{r}\right) \right] .$$

$$\Delta\varphi = -4\pi\rho \, .$$

$$\Delta\varphi = -\frac{8\sqrt{2}}{3\pi} \varphi^{3/2}, \qquad \varphi = \frac{\left(3\pi^2 n\right)^{2/3}}{2} \cdot$$

11.35

$$n(r) = (1 + \lambda)\, n_0(r) \, .$$

$$\delta E = E\left(n(r)\right) - E\left(n_0(r)\right) \approx \left(\frac{3}{5} T + 2U_{ee} + U_{en} \right) \lambda \, .$$

$$3T + 6U_{ee} + 5U_{en} = 0 \, .$$

$$n(r) = n_0\left(r(1 + \lambda)\right) .$$

$$3T + 5U_{ee} + 2U_{en} = 0 \, .$$

$$2T = -U, \qquad U_{ee} = -\frac{U_{en}}{7} \, .$$

Тема 11: Борновське наближення у пружному розсіянні.

В теории в общем случае амплитуда рассеяния определяется как

$$f^{(1)}\left(\vec{k},\vec{k}'\right)=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int U\left(\vec{r}\right)\exp\left(i\vec{q}\vec{r}\right)d^3r .$$

Здесь

$$\vec{q}=\vec{k}-\vec{k}' .$$

есть минус переданный импульс. Квадрат модуля q определяется по теореме косинусов

$$q^2=2k^2\left(1-\cos\theta\right),$$

причем θ здесь – угол рассеяния.

Надо заметить, что определение $\vec{q}$ может быть задано и наоборот, и это определение различается в разных источниках. Вариант записан, например, в книге Ю.А. Бережного, а $\vec{q}=\vec{k}'-\vec{k}$, например, в Ландау-Лифшиц и в задачнике Галицкого. Тогда знак при $\vec{q}$ может отличаться.

Рассмотрим случай, когда потенциал сферически симметричен:

$$f^{(1)}\left(\vec{k},\vec{k}'\right)=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int U\left(\vec{r}\right)\exp\left(i\vec{q}\vec{r}\right)d^3r=-\frac{m\cdot 2\pi}{2\pi\hbar^2}\int\limits_0^{\infty}dr\cdot r^2\cdot U\left(r\right)\int\limits_0^{\pi}d\theta\cdot\sin\theta\cdot\exp\left(iqr\cos\theta\right)=$$

$$\left\{\int\limits_0^{\pi}d\theta\cdot\sin\theta\cdot\exp\left(iqr\cos\theta\right)=\frac{-1}{iqr}\int\limits_0^{\pi}d\left(iqr\cos\theta\right)\cdot\exp\left(iqr\cos\theta\right)=\frac{2}{iqr\cdot 2}\left(e^{iqr}-e^{-iqr}\right)=\frac{2}{qr}\sin qr\right\}$$

$$=-\frac{m}{\hbar^2}\int\limits_0^{\infty}dr\cdot r^2\cdot U\left(r\right)\frac{2}{qr}\sin qr=-\frac{2m}{\hbar^2 q}\int\limits_0^{\infty}dr\cdot r\cdot U\left(r\right)\cdot\sin qr$$

$$\boxed{f^{(1)}\left(q\right)=-\frac{2m}{\hbar^2 q}\int\limits_0^{\infty}dr\cdot r\cdot U\left(r\right)\cdot\sin qr}\ .$$

Сечение рассеяния

$$\sigma\left(E\right)=\int\left|f\left(q\right)\right|^2 d\Omega .$$

$$\sigma\left(E\right)=\int\left|f\left(q\right)\right|^2 d\Omega=\int\limits_0^{2\pi}d\varphi\int\limits_0^{\pi}d\theta\cdot\sin\theta\cdot\left|f\left(q\right)\right|^2=2\pi\int\limits_0^{\pi}d\theta\cdot\sin\theta\cdot\left|f\left(q\right)\right|^2=$$

$$\left\{\begin{array}{l} q^2=2k^2\left(1-\cos\theta\right)\Rightarrow \cancel{2}qdq=\cancel{2}k^2\sin\theta d\theta\Rightarrow\sin\theta d\theta=\dfrac{qdq}{k^2}= \\ \dfrac{k^2\hbar^2}{2m}=E\Rightarrow k^2=\dfrac{2mE}{\hbar^2} \\ \Rightarrow\sin\theta d\theta=\dfrac{qdq}{k^2}=\dfrac{\hbar^2 qdq}{2mE}\end{array}\right\} .$$

$$=2\pi\int\limits_0^{\sqrt{8mE/\hbar^2}}\frac{\hbar^2 qdq}{2mE}\cdot\left|f\left(q\right)\right|^2=\frac{2\pi\hbar^2}{2mE}\int\limits_0^{\sqrt{8mE/\hbar^2}}qdq\cdot\left|f\left(q\right)\right|^2$$

$$\boxed{\sigma\left(E\right)=\frac{\pi\hbar^2}{mE}\int\limits_0^{\sqrt{8mE/\hbar^2}}f^2\left(q\right)\cdot q\cdot dq}\ .$$

Условия применения первого борновского приближения, $\left|\psi^{(1)}\left(\vec{r}\right)\right|\ll\left|\psi^{(0)}\left(\vec{r}\right)\right|$:

$$\frac{m}{2\pi\hbar^2}\left|\int r^2 dr d\Omega \frac{\exp(ikr)}{r}\cdot U(\vec{r})\exp(i\vec{k}\vec{r})\right| = 1 .$$

Или в случае сферически симметричного поля

$$\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{2\pi}{k}\left|\int dr U(\vec{r})\left[\exp(2ikr)-1\right]\right| = 1 .$$

$$\boxed{\frac{m}{\hbar^2 k}\left|\int dr U(\vec{r})\left[\exp(2ikr)-1\right]\right| = 1} .$$

Борновское приближение применимо при выполнении хотя бы одного из условий

$$|U| = \frac{\hbar^2}{mR_0^2}, \qquad |U| = \frac{\hbar^2 v}{R_0},$$

R_0 – радиус действия поля (см. Landafschitz).

****

(13.4) Найти в борновском приближении амплитуду рассеяния и полное сечение рассеяния частиц в полях $U(r)$, указанных ниже. Исследовать предельные случаи малых и больших энергий частиц. Указать условия применимости рассмотрения.

а) $U(r) = a\delta(r-R)$; б) $U(r) = U_0 e^{-r/R}$

в) $U(r) = \dfrac{a}{r}e^{-r/R}$; г) $U(r) = \dfrac{a}{r^2}$

д) $U(r) = \begin{cases} U_0, & r < R \\ 0, & r > R \end{cases}$; е) $U(r) = U_0 e^{-r^2/R^2}$

-

Формулы для решения задачи такие:

Амплитуда рассеяния в сферически симметричном случае считается по формуле .

Полное сечение рассеяния считается по формуле .

Таким образом, в данной задаче необходимо только посчитать эти интегралы

Рассматриваем случай

а) $U(r) = a\delta(r-R)$

$$f(q) = -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^\infty dr\cdot r\cdot U(r)\cdot\sin qr = -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^\infty dr\cdot r\cdot a\delta(r-R)\cdot\sin qr = $$
$$= -\frac{2m}{\hbar^2 q}R\cdot a\cdot\sin qR = -\frac{2maR^2}{\hbar^2}\frac{\sin qR}{qR} .$$

- -

$$\sigma(E) = \frac{\pi\hbar^2}{mE}\int_0^{\sqrt{8mE/\hbar^2}}\left(\frac{2maR^2}{\hbar^2}\frac{\sin qR}{qR}\right)^2\cdot q\cdot dq = \frac{\pi\hbar^2}{mE}\frac{4m^2a^2R^4}{\hbar^4}\int_0^{\sqrt{8mE/\hbar^2}}\frac{\sin^2 qR}{(qR)^2}\cdot q\cdot dq =$$
$$= \frac{\pi}{E}\frac{4ma^2R^4}{\hbar^2}\frac{1}{R^2}\int_0^{\sqrt{8mE/\hbar^2}}\frac{\sin^2 qR}{(qR)^2}\cdot qR\cdot dqR = \frac{\pi}{E}\frac{4ma^2R^4}{\hbar^2}\frac{1}{R^2}\int_0^{R\sqrt{8mE/\hbar^2}}\frac{\sin^2 x}{x}dx .$$

Таким образом,

$$\sigma(E) = \frac{4\pi m a^2 R^2}{\hbar^2 E} \int_0^{R\sqrt{8mE/\hbar^2}} \frac{\sin^2 x}{x} dx.$$

Интеграл не берется, хоть и выражается через интегральный синус.

\- -

$E = 1$

$$\sigma(E) \approx \frac{4\pi m a^2 R^2}{\hbar^2 E} \int_0^{R\sqrt{8mE/\hbar^2}} \frac{x^2}{x} dx = \frac{4\pi m a^2 R^2}{\hbar^2 E} \frac{1}{2} x^2 \Big|_0^{R\sqrt{8mE/\hbar^2}} = .$$

$$= \frac{4\pi m a^2 R^2}{\hbar^2 E} \frac{1}{2} R^2 \frac{8mE}{\hbar^2} = \frac{16\pi m^2 a^2 R^4}{\hbar^4}$$

\- -

E ? 1: заменяем синус $\sin^2 x$ его средним значением $1/2$

$$\sigma(E) \approx \frac{4\pi m a^2 R^2}{\hbar^2 E} \int_0^{R\sqrt{8mE/\hbar^2}} \frac{\sin^2 x}{x} dx = \frac{4\pi m a^2 R^2}{\hbar^2 E} \frac{1}{2} \int_0^{R\sqrt{8mE/\hbar^2}} \frac{dx}{x} =$$

$$= \frac{2\pi m a^2 R^2}{\hbar^2 E} \ln x \Big|_0^{R\sqrt{8mE/\hbar^2}} = \frac{2\pi m a^2 R^2}{\hbar^2 E} \ln \sqrt{8mER^2/\hbar^2} = \frac{\pi m a^2 R^2}{\hbar^2 E} \ln\left(8mER^2/\hbar^2\right).$$

\- -

Применимость:

$$a\delta(r - R) = \frac{\hbar^2}{mR^2}, \qquad a\delta(r - R) = \frac{\hbar^2 v}{R}$$

Размерность дельта-функции $\delta(x)$ есть $\frac{1}{x}$. Тогда

$$a = \frac{\hbar^2}{mR}, \qquad a = \hbar^2 v.$$

\- -

\- -

б) $U(r) = U_0 e^{-r/R}$

$$f(q) = -\frac{2mU_0}{\hbar^2 q} \int_0^\infty dr \cdot r \cdot e^{-r/R} \cdot \sin qr = -\frac{2mU_0 R^2}{\hbar^2 q} \int_0^\infty d\frac{r}{R} \cdot \frac{r}{R} \cdot e^{-r/R} \cdot \sin\left(qR\frac{r}{R}\right) =$$

$$= -\frac{2mU_0 R^2}{\hbar^2 q} \int_0^\infty dx \cdot x \cdot e^{-x} \cdot \sin(qRx) = \int_0^\infty dx \cdot x \cdot e^{-x} \sin tx = \frac{2t}{\left(1 + t^2\right)^2} = .$$

$$= -\frac{2mU_0 R^2}{\hbar^2 q} \frac{2qR}{\left(1 + (qR)^2\right)^2} = -\frac{4mU_0 R^3}{\hbar^2} \frac{1}{\left(1 + (qR)^2\right)^2}$$

\- -

$$\sigma\left(E\right)=\frac{\pi\hbar^2}{mE}\int\limits_0^{\sqrt{8mE/\hbar^2}}\left(\frac{4mU_0R^3}{\hbar^2}\frac{1}{\left(1+\left(qR\right)^2\right)^2}\right)^2\cdot q\cdot dq=$$

$$=\frac{\pi\hbar^2}{mE}\frac{16m^2U_0^2R^6}{\hbar^4}\int\limits_0^{\sqrt{8mE/\hbar^2}}\frac{qdq}{\left(1+\left(qR\right)^2\right)^4}=\frac{\pi}{E}\frac{16mU_0^2R^6}{\hbar^2}\int\limits_0^{\sqrt{8mE/\hbar^2}}\frac{qdq}{\left(1+\left(qR\right)^2\right)^4}=$$

$$=\frac{16\pi mU_0^2R^6}{E\hbar^2}\frac{1}{R^2}\int\limits_0^{\sqrt{8mE/\hbar^2}}\frac{qRdqR}{\left(1+\left(qR\right)^2\right)^4}=\frac{16\pi mU_0^2R^4}{E\hbar^2}\int\limits_0^{R\sqrt{8mE/\hbar^2}}\frac{xdx}{\left(1+x^2\right)^4}=$$

$$\int\limits_0^a\frac{xdx}{\left(1+x^2\right)^4}=\frac{1}{2}\int\limits_0^{a^2}\frac{dy}{\left(1+y\right)^4}=-\frac{1}{2}\cdot\frac{1}{3}\cdot\frac{1}{\left(1+y\right)^3}\Bigg|_0^{a^2}=-\frac{1}{6}\left(\frac{1}{\left(1+a^2\right)^3}-1\right)=\frac{1}{6}\left(1-\frac{1}{\left(1+a^2\right)^3}\right)$$

$$=\frac{16\pi mU_0^2R^4}{E\hbar^2}\frac{1}{6}\left(1-\frac{1}{\left(1+8mER^2/\hbar^2\right)^3}\right)=\frac{8\pi mU_0^2R^4}{3E\hbar^2}\left(1-\frac{1}{\left(1+8mER^2/\hbar^2\right)^3}\right)$$

- -

$E = 1$

$$\sigma\left(E\right)=\frac{8\pi mU_0^2R^4}{3E\hbar^2}\left(1-\frac{1}{\left(1+8mER^2/\hbar^2\right)^3}\right)\approx\frac{8\pi mU_0^2R^4}{3E\hbar^2}\left(1+24mER^2/\hbar^2-1\right)=$$

$$=\frac{8\pi mU_0^2R^4}{3E\hbar^2}\frac{24mER^2}{\hbar^2}=\frac{64\pi m^2U_0^2R^6}{\hbar^4}.$$

- -

E ? 1

$$\sigma\left(E\right)=\frac{8\pi mU_0^2R^4}{3E\hbar^2}\left(1-\frac{1}{\left(1+8mER^2/\hbar^2\right)^3}\right)\approx\frac{8\pi mU_0^2R^4}{3E\hbar^2}.$$

- -

Применимость:

$$U_0=\frac{\hbar^2}{mR^2},\qquad U_0=\frac{\hbar^2 v}{R}.$$

- -
- -

в) $U\left(r\right)=\frac{a}{r}e^{-r/R}$

$$f(q) = -\frac{2ma}{\hbar^2 q}\int_0^\infty dr\cdot r\cdot\frac{e^{-r/R}}{r}\cdot\sin qr = -\frac{2ma}{\hbar^2 q}R\int_0^\infty d(r/R)\cdot e^{-r/R}\cdot\sin(qR\cdot r/R) =$$

$$\left[\int_0^\infty dx\cdot e^{-x}\sin tx = \frac{t}{1+t^2}\right].$$

$$= -\frac{2ma}{\hbar^2}\frac{R^2}{\left(1+q^2R^2\right)}$$

Интеграл берется неопределенный, дважды по частям, с выражением искомого интеграла через себя же.

\- -

$$\sigma(E) = \frac{\pi\hbar^2}{mE}\int_0^{\sqrt{8mE/\hbar^2}}\left(\frac{2maR^2}{\hbar^2\left(1+q^2R^2\right)}\right)^2\cdot q\cdot dq = \frac{\pi\hbar^2 4m^2a^2R^4}{mE\hbar^4}\int_0^{\sqrt{8mE/\hbar^2}}\frac{qdq}{\left(1+q^2R^2\right)^2} = .$$

$$= \frac{\pi\hbar^2\cdot 4m^2a^2R^4}{mE\hbar^4}\frac{1}{2R^2}\int_0^{\sqrt{8mE/\hbar^2}}\frac{d(qR)^2}{\left(1+(qR)^2\right)^2} =$$

$$= \frac{2\pi ma^2R^2}{E\hbar^2}\int_0^{8mER^2/\hbar^2}\frac{dx}{(1+x)^2} = \frac{2\pi ma^2R^2}{E\hbar^2}\left(-\frac{1}{1+x}\right)\Bigg|_0^{8mER^2/\hbar^2} =$$

$$= \frac{2\pi ma^2R^2}{E\hbar^2}\left(1-\frac{1}{1+8mER^2/\hbar^2}\right) = \frac{2\pi ma^2R^2}{E\hbar^2}\cdot\frac{8mER^2/\hbar^2}{1+8mER^2/\hbar^2} =$$

$$= \frac{16\pi m^2a^2R^4}{\hbar^4}\cdot\frac{1}{1+8mER^2/\hbar^2}$$

\- -

$E = 1$

$$\sigma(E) = \frac{16\pi m^2a^2R^4}{\hbar^4}\cdot\frac{1}{1+8mER^2/\hbar^2} \approx \frac{16\pi m^2a^2R^4}{\hbar^4}\cdot\left(1-8mER^2/\hbar^2\right)$$

\- -

E ? 1

$$\sigma(E) = \frac{16\pi m^2a^2R^4}{\hbar^4}\cdot\frac{1}{1+8mER^2/\hbar^2} \approx \frac{16\pi m^2a^2R^4}{\hbar^4}\cdot\frac{1}{8mER^2/\hbar^2} = \frac{2\pi ma^2R^2}{\hbar^2 E}$$

\- -

Применимость:

$$|a| = \frac{\hbar^2}{mR}, \qquad |a| = \hbar^2 v.$$

\- -

\- -

г) $U(r) = \frac{a}{r^2}$

$$f(q) = -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^\infty dr\cdot\frac{a}{r}\cdot\sin qr = -\frac{2ma}{\hbar^2 q}\int_0^\infty\frac{dr}{r}\sin qr = -\frac{2ma}{\hbar^2 q}\int_0^\infty\frac{d(qr)}{qr}\sin qr =$$

$$= -\frac{2ma}{\hbar^2 q}\frac{\pi}{2} = -\frac{\pi ma}{\hbar^2 q}.$$

- -

$$\sigma(E) = \frac{\pi\hbar^2}{mE}\int_0^{\sqrt{8mE/\hbar^2}}\left(\frac{\pi ma}{\hbar^2 q}\right)^2\cdot q\cdot dq = \frac{\pi^3 a^2 m}{\hbar^2 E}\int_0^{\sqrt{8mE/\hbar^2}}\frac{1}{q}dq = \infty.$$

- -

$E = 1$

$E \;?\; 1$

- -

Применимость:

$$|a| = \frac{\hbar^2}{m}.$$

- -

- -

д) $U(r) = \begin{cases} U_0, & r < R \\ 0, & r > R \end{cases}$

$$f(q) = -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^R dr\cdot r\cdot U_0\cdot\sin qr = -\frac{2m}{\hbar^2 q}\frac{U_0}{q^2}\int_0^R dr\cdot r\cdot\sin qr =$$

$$\int_0^A x\sin x dx = \sin A - A\cos A$$

$$= -\frac{2mU_0}{\hbar^2 q^3}(\sin qR - qR\cos qR) = \frac{2mU_0}{\hbar^2}\left(\frac{R\cos qR}{q^2} - \frac{\sin qR}{q^3}\right).$$

- -

$$\sigma(E) = \frac{\pi\hbar^2}{mE}\int_0^{\sqrt{8mE/\hbar^2}}\left(\frac{2mU_0}{\hbar^2}\left(\frac{R\cos qR}{q^2} - \frac{\sin qR}{q^3}\right)\right)^2\cdot q\cdot dq =$$

$$\frac{\pi\hbar^2}{mE}\left(\frac{2mU_0}{\hbar^2}\right)^2\int_0^{\sqrt{8mE/\hbar^2}=2k}\left(\frac{R^2\cos^2 qR}{q^4} + \frac{\sin^2 qR}{q^6} - 2R\frac{\sin qR\cos qR}{q^5}\right)\cdot q\cdot dq = \cdot$$

$$= \frac{\pi\hbar^2}{mE}\frac{4m^2U_0^2}{\hbar^4}\int_0^{2k}\left(\frac{R^2\cos^2 qR}{q^3} + \frac{\sin^2 qR}{q^5} - 2R\frac{\sin qR\cos qR}{q^4}\right)\cdot dq =$$

$$\left\{\begin{aligned}
&\int_0^{2k}\left(\frac{R^2\cos^2 qR}{q^3}+\frac{\sin^2 qR}{q^5}-2R\frac{\sin qR\cos qR}{q^3}\right)\cdot dq=\\
&\int_0^{2k}\left(\frac{R^2\cos^2 qR}{(qR)^3}R^3+\frac{\sin^2 qR}{(qR)^5}R^5-2R\frac{\sin qR\cos qR}{(qR)^4}R^4\right)\cdot\frac{d(qR)}{R}=\\
&=R^4\int_0^{2kR}\left(\frac{\cos^2 x}{x^3}+\frac{\sin^2 x}{x^5}-2\frac{\sin x\cos x}{x^4}\right)dx=\\
&\left\{\int_0\left(\frac{\cos^2 x}{x^3}+\frac{\sin^2 x}{x^5}-2\frac{\sin x\cos x}{x^4}\right)dx=\frac{1}{4}\left(1-\frac{1}{t^2}+\frac{\sin 2t}{t^3}-\frac{\sin^2 t}{t^4}\right)\right\}\\
&=\frac{R^4}{4}\left(1-\frac{1}{(2kR)^2}+\frac{\sin 4kR}{(2kR)^3}-\frac{\sin^2 2kR}{(2kR)^4}\right)
\end{aligned}\right\}.$$

$$=\frac{\pi}{E}\frac{4mU_0^2}{\hbar^2}\frac{R^4}{4}\left(1-\frac{1}{(2kR)^2}+\frac{\sin 4kR}{(2kR)^3}-\frac{\sin^2 2kR}{(2kR)^4}\right)=$$

$$=\frac{\pi mU_0^2R^4}{\hbar^2\left(k^2\hbar^2/2m\right)}(\ldots)=\frac{2\pi m^2U_0^2R^4}{\hbar^4k^2}\left(1-\frac{1}{(2kR)^2}+\frac{\sin 4kR}{(2kR)^3}-\frac{\sin^2 2kR}{(2kR)^4}\right).$$

- -

$E = 1$

$$\sigma(E)=\frac{2\pi m^2U_0^2R^4}{\hbar^4k^2}\left(1-\frac{1}{(2kR)^2}+\frac{\sin 4kR}{(2kR)^3}-\frac{\sin^2 2kR}{(2kR)^4}\right)=$$

$$\left\{1-\frac{1}{(2kR)^2}+\frac{\sin 4kR}{(2kR)^3}-\frac{\sin^2 2kR}{(2kR)^4}\approx\frac{2}{9}(2kR)^2\right\}.$$

$$=\frac{2\pi m^2U_0^2R^4}{\hbar^4k^2}\frac{2}{9}\cdot 4k^2R^2=\frac{16\pi m^2U_0^2R^6}{9\hbar^4}$$

- -

E ? 1

$$\sigma(E)=\frac{2\pi m^2U_0^2R^4}{\hbar^4k^2}\left(1-\frac{1}{(2kR)^2}+\frac{\sin 4kR}{(2kR)^3}-\frac{\sin^2 2kR}{(2kR)^4}\right)\approx\frac{2\pi m^2U_0^2R^4}{\hbar^4k^2}=\frac{\pi mU_0^2R^4}{\hbar^2E}.$$

- -

Применимость:

$$|U_0|=\frac{\hbar^2}{mR^2},\qquad |U_0|=\frac{\hbar^2 v}{R}.$$

- -
- -

e) $U(r)=U_0e^{-r^2/R^2}$

$$f(q) = -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^\infty dr\cdot r\cdot U_0 e^{-r^2/R^2}\cdot\sin qr = -\frac{2mU_0}{\hbar^2 q}R^2\int_0^\infty d\frac{r}{R}\cdot\frac{r}{R}\cdot e^{-(r/R)^2}\cdot\sin\left(qR\frac{r}{R}\right) =$$

$$\int_0^\infty dx\cdot x\cdot e^{-x^2}\cdot\sin(tx) = t\frac{\sqrt{\pi}}{4}\exp\left(-t^2/4\right)$$.

$$= -\frac{2mU_0}{\hbar^2 q}R^2\cdot qR\frac{\sqrt{\pi}}{4}\exp\left(-q^2R^2/4\right) = -\frac{\sqrt{\pi}mU_0R^3}{2\hbar^2}\exp\left(-q^2R^2/4\right)$$

- -

$$\sigma(E) = \frac{\pi\hbar^2}{mE}\int_0^{\sqrt{8mE/\hbar^2}}\left(\frac{\sqrt{\pi}mU_0R^3}{2\hbar^2}\exp\left(-q^2R^2/4\right)\right)^2\cdot q\cdot dq =$$

$$= \frac{\pi\hbar^2}{mE}\cdot\frac{\pi m^2U_0^2R^6}{4\hbar^4}\int_0^{\sqrt{8mE/\hbar^2}}\exp\left(-q^2R^2/2\right)\cdot q\cdot dq =$$

$$= \frac{\pi^2 mU_0^2R^6}{4E\hbar^2}\cdot\frac{2}{R^2}\int_0^{\sqrt{8mE/\hbar^2}}\exp\left(-q^2R^2/2\right)\cdot\left(qR/\sqrt{2}\right)\cdot d\left(qR/\sqrt{2}\right) =$$.

$$= \frac{\pi^2 mU_0^2R^4}{2E\hbar^2}\int_0^{R\sqrt{4mE/\hbar^2}}\exp\left(-x^2\right)\cdot x\cdot dx = \frac{\pi^2 mU_0^2R^4}{2E\hbar^2}\frac{1}{2}\int_0^{R^2 4mE/\hbar^2}e^{-y}dy =$$

$$= \frac{\pi^2 mU_0^2R^4}{4E\hbar^2}\left(1-e^{-4mER^2/\hbar^2}\right)$$

- -

$E = 1$

$$\sigma(E) = \frac{\pi^2 mU_0^2R^4}{4E\hbar^2}\left(1-e^{-4mER^2/\hbar^2}\right) \approx \frac{\pi^2 mU_0^2R^4}{4E\hbar^2}\left(4mER^2/\hbar^2\right) = \frac{\pi^2 m^2U_0^2R^6}{\hbar^4}$$

- -

$E ? 1$

$$\sigma(E) = \frac{\pi^2 mU_0^2R^4}{4E\hbar^2}\left(1-e^{-4mER^2/\hbar^2}\right) \approx \frac{\pi^2 mU_0^2R^4}{4E\hbar^2}$$

- -

Применимость:

$$|U_0| = \frac{\hbar^2}{mR^2}, \qquad |U_0| = \frac{\hbar^2 v}{R}.$$

****

(13.6) Показать, что в условиях применимости борновского приближения полное сечение рассеяния частиц в произвольном центральном поле как функция энергии удовлетворяет неравенству $\frac{d}{dE}E\sigma(E) \ge 0$ (*i.e.*, $E\sigma(E)$ – монотонно растущая функция энергии E)

-

Воспользуемся выражением

$$E\sigma(E) = \frac{\pi\hbar^2}{m}\int_0^{\sqrt{8mE/\hbar^2}}f^2(q)\cdot q\cdot dq.$$

Учитывая положительность подынтегральной функции и то, что предел интегрирования монотонно растет с ростом E, приходим к доказываемому утверждению.

****

<u>(13.7)</u> Показать, что при рассеянии частиц в поле притяжения $U(\vec{r}) \le 0$ или в поле отталкивания $U(\vec{r}) \ge 0$ в условиях применимости борновского приближения максимальное значение сечения рассеяния $\sigma(E)$ имеют частицы с энергией $E = 0$.

-

$$\sigma(E) = \int \left| f(q) \right|^2 d\Omega .$$

$$f(\vec{q}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(\vec{r}) \exp(i\vec{q}\vec{r})\, d^3 r .$$

Что есть амплитуда рассеяния при $E = 0$? Следует учесть, что

$$q^2 = 2k^2(1-\cos\theta) = 4mE/\hbar^2 \cdot (1-\cos\theta) .$$

То есть, при $E = 0$ и $q = 0$. При расчете $\sigma(E = 0)$ зависимость от углов интегрирования отсутствует:

$$\sigma(E = 0) = \int \left| f(q) \right|^2 d\Omega = \int \left| f(0) \right|^2 d\Omega = 4\pi \left| f(0) \right|^2 .$$

$$\left| f(\vec{q}) \right| = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \left| \int U(\vec{r}) \exp(i\vec{q}\vec{r})\, d^3 r \right| .$$

$$\left| f(0) \right| = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \left| U(\vec{r}) \right| d^3 r = \left| \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(\vec{r})\, d^3 r \right| .$$

Здесь имеет значение постоянство знака $U(\vec{r})$, заданное условием задачи. Ввиду осциллирования $\exp(i\vec{q}\vec{r})$,

$$\left| f(q = 0) \right| \ge \left| f(q \ne 0) \right| .$$

Таким образом, оказывается и $\sigma(E = 0) \ge \sigma(E \ne 0)$.

****

<u>(13.13)</u> Выразить в борновском приближении амплитуду рассеяния на двух одинаковых силовых центрах, находящихся на расстоянии $\vec{a}$ друг от друга, т.е. $U(\vec{r}) = U_0(\vec{r}) + U_0(\vec{r} - \vec{a})$, через амплитуду рассеяния на одном центре $U_0(\vec{r})$.

Найти соотношения между сечениями рассеяния на двух и одном центре в случаях:

1) $ka \gg 1$ (при этом величина kR может быть произвольной, R – радиус действия сил отдельного центра)

2) $kR \sim 1$ и $a \gg R$ (*т.е.* расстояние между центрами много больше радиуса действия сил отдельных центров)

-

Пусть $\vec{r}$ – радиус-вектор от первого центра к точке измерения. $\vec{a}$ – радиус-вектор от первого центра ко второму. Тогда радиус-вектор от первого центра к точке измерения будет $\vec{r}_2 = \vec{r} - \vec{a}$.

Запишем $f^{(1)}(\vec{k}, \vec{k}')$ исходя из общей формулы определения амплитуды рассеяния. Слагаемое, отвечающее за разницу радиус-векторов, выходит из экспоненты в виде множителя и выносится за знак интеграла (получаем сдвиг по фазе).

$$
\begin{aligned}
f^{(1)}\left(\vec{k},\vec{k}'\right) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int\left(U\left(\vec{r}\right)+U\left(\vec{r}-\vec{a}\right)\right)\exp\left(i\vec{q}\vec{r}\right)d^3r = \\
&= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\left[\int U\left(\vec{r}\right)\exp\left(i\vec{q}\vec{r}\right)d^3r+\int U\left(\vec{r}-\vec{a}\right)\exp\left(i\vec{q}\left(\vec{r}-\vec{a}+\vec{a}\right)\right)d^3\left(\vec{r}-\vec{a}\right)\right] = \\
&= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\left[\int U\left(\vec{r}\right)\exp\left(i\vec{q}\vec{r}\right)d^3r+\exp\left(i\vec{q}\vec{a}\right)\int U\left(\vec{r}'\right)\exp\left(i\vec{q}\left(\vec{r}'\right)\right)d^3r'\right] = \\
&= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\left(1+\exp\left(i\vec{q}\vec{a}\right)\right)\int U\left(\vec{r}\right)\exp\left(i\vec{q}\vec{r}\right)d^3r = \left(1+\exp\left(i\vec{q}\vec{a}\right)\right)f\left(\vec{q}\right)
\end{aligned}
$$

Определение

$$\vec{q}=\vec{k}-\vec{k}'$$

означает

$$q^2 = 2k^2\left(1-\cos\theta\right),$$

и, таким образом, $ka \ll 1$ определяет и $qa \ll 1$.

В случае $qa \ll 1$ экспонента $\exp\left(i\vec{q}\vec{a}\right)$ мало отличается от единицы, и этим отличием пренебрегаем. Поэтому

$$\sigma_{2centres}\left(E\right) \approx 2^2\int\left|f_1\left(\vec{q}\right)\right|^2 d\Omega = 4\sigma_{1centre}\left(E\right).$$

Рассмотрим второй случай, $kR \sim 1$ и $a \gg R$.

По поводу определения квадрата модуля в сечении рассеяния: $\left|1+\exp\left(i\vec{q}\vec{a}\right)\right|^2$ можно определить, если нарисовать $1+\exp\left(i\vec{q}\vec{a}\right)$ на комплексной плоскости. Используя теорему косинусов, имеем

/угол между отрезками $\left[0,1\right]$ и $\left[1,1+\exp\left(i\vec{q}\vec{a}\right)\right]$ равен $\pi-\vec{q}\vec{a}$, поэтому косинус этого угла равен: $\cos\left(\pi-\vec{q}\vec{a}\right)=-\cos\vec{q}\vec{a}$ /:

$$\left|1+\exp\left(i\vec{q}\vec{a}\right)\right|^2 = 1^2+1^2-2\cdot(-2\cos\vec{q}\vec{a}) = 2+2\cos\vec{q}\vec{a},$$

и тогда

$$\sigma_{2c} = 2\int\left|f_1\left(\vec{q}\right)\right|^2\left(1-\cos\vec{q}\vec{a}\right)d\Omega.$$

Второе слагаемое при $a \gg R$ окажется быстро осциллирующим, и его вкладом пренебрегаем. Таким образом, в данном случае

$$\sigma_{2centres} \approx 2\sigma_{1centre}.$$

Фраза из Галицкого: такое различие в коэффициентах обуславливается изменением характера интерференции.

Тема 12: Формалізм парціальних хвиль.

****

<u>(13.17)</u> получить выражение для фазовых сдвигов $\delta_l(k)$ в условиях применимости борновского приближения непосредственно из разложения по парциальным волнам амплитуды рассеяния в центральном поле.
Воспользоваться известным из теории функций Бесселя соотношением $/\,x, y > 0\,/$

$$\frac{\sin\sqrt{x^2+y^2-2xy\cos\varphi}}{\sqrt{x^2+y^2-2xy\cos\varphi}} = \frac{\pi}{2\sqrt{xy}}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,J_{l+1/2}(x)\,J_{l+1/2}(y)\,P_l(\cos\varphi)\,.$$

-

Формулу можно получить, комбинируя формулы (8.533) и (8.481) из справочника Градштейна-Рыжика
http://lib.org.by/info/M_Mathematics/MRef_References/Gradshteyn,%20Ryzhik.%20Tables%20of%20integrals,%20series,%20and%20products%20%285ed.,%20AP,%201996%29%281762s%29.pdf#

Фазовый сдвиг можно получить, используя выражение амплитуды рассеяния через собственно фазовый сдвиг – ЛЛ3 (122.10).

$$f(\vartheta) = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left(e^{2i\delta_l}-1\right)P_l(\cos\vartheta)\,.$$

Для амплитуды расеяния в центральном поле имеется и формула

$$f^{(1)}(q) = -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^{\infty} dr\cdot r\cdot U(r)\cdot\sin qr\,.$$

Выражение для фазового сдвига получим, сравнивая эти две формулы.

$$f^{(1)}(q) = -\frac{2m\cancel{q}}{\hbar^2\cancel{q}}\int_0^{\infty} dr\cdot r\cdot U(r)\cdot\frac{\sin qr}{qr}\cdot r = -\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^{\infty} dr\cdot r^2\cdot U(r)\cdot\frac{\sin qr}{qr}\,.$$

Для q имеется выражение

$$q^2 = 2k^2(1-\cos\theta)\,,$$

Таким образом можно применить формулу , где принимаем $x = kr,\quad y = kr$

$$qr = \sqrt{(kr)^2+(kr)^2-2kr\cdot kr\cdot\cos\vartheta}\,.$$

$$f^{(1)}(q) = -\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^{\infty} dr\cdot r^2\cdot U(r)\cdot\frac{\pi}{2\sqrt{kr\cdot kr}}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,J_{l+1/2}(kr)\,J_{l+1/2}(kr)\,P_l(\cos\vartheta)\,.$$

$$f^{(1)}(q) = -\frac{\pi m}{k\hbar^2}\int_0^{\infty} dr\cdot r\cdot U(r)\cdot\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,J^2_{l+1/2}(kr)\,P_l(\cos\vartheta)\,.$$

Сравнивая и , получаем

$$\frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left(e^{2i\delta_l}-1\right)P_l(\cos\vartheta) = -\frac{\pi m}{k\hbar^2}\int_0^{\infty} dr\cdot r\cdot U(r)\cdot\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,J^2_{l+1/2}(kr)\,P_l(\cos\vartheta)\,.$$

именно малость фазовых сдвигов обеспечивает приближенно вещественность амплитуды рассеяния, как это имеет место в борновском приближении\\

$e^{2i\delta_l}-1$ можно приблизительно записать как $e^{2i\delta_l}-1\approx 2i\delta_l$. Тогда

$$\boxed{\delta_l = -\frac{\pi m}{\hbar^2}\int_0^\infty dr \cdot r \cdot U(r) \cdot J^2_{l+1/2}(kr)}.$$

Эта формула может понадобиться и для решения других задач.

****

(13.19) В условиях применимости борновского приближения найти поведение фазовых сдвигов при энергии частицы $E \to 0$. Ограничиться потенциалами $U(r)$, убывающими при $r \to \infty$ быстрее любой степени r (например, экспонента $U \propto e^{-r/R}$).

-

Стремление к нулю энергии $E \to 0$ означает стремление к нулю и $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$.

Для решения задачи воспользуемся формулой , учтя малость аргумента функции Бесселя:

$$J_{l+1/2}(x) \approx \frac{1}{\Gamma(l+3/2)}\left(\frac{x}{2}\right)^{l+1/2} \qquad x^2 = l + 1/2 .$$

Тогда

$$\delta_l = -\frac{\pi m}{\hbar^2}\frac{1}{\Gamma^2(l+3/2)}\int_0^\infty dr \cdot r \cdot U(r) \cdot \left(\frac{kr}{2}\right)^{2l+1} \propto k^{2l+1} .$$

****

(13.20) Найти поведение борновских фазовых сдвигов при $k \to \infty$. Ограничиться потенциалами $U(r)$, поведение которых при $r \to 0$ удовлетворяет условию $Ur \to 0$.

-

В данной задаче аргумент Бесселя, в отличие от предыдущей задачи, велик. Заменяем ее асимптотикой, которая окажется верной на всем диапазоне r кроме малой окрестности $r \to 0$. При выполнении условия $Ur \xrightarrow[r \to 0]{} 0$ вклад этой окрестности несущественен. Асимптотика имеет вид

$$J_{l+1/2}(x) \approx \left(\frac{2}{\pi x}\right)^{1/2} \sin\left(x - \frac{\pi l}{2}\right) \qquad x \; ? \; (l+1/2)^2 .$$

Таким образом, подставляя ее в формулу , получаем

$$\delta_l = -\frac{\pi m}{\hbar^2}\int_0^\infty dr \cdot r \cdot U(r) \cdot \left(\frac{2}{\pi k r}\right)\sin^2\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right).$$

Быстро осциллирующий $\sin^2\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)$ заменяем на его среднее значение, равное $1/2$.

Получаем

$$\delta_l \approx -\frac{m}{k\hbar^2}\int_0^\infty dr \cdot U(r) .$$

Тема 13: Формалізм парціальних хвиль.

****

(13.22) Найти в борновском приближении фазовые сдвиги s-волн (l=0) в полях:
а) $U(r) = U_0 R\delta(r-R)$; б) $U(r) = U_0 e^{-r/R}$;

Используя результат, найти для указанных полей сечение рассеяния медленных частиц. Указать условия применимости и сравнить с результатами 13.4 а,б.

Для решения задачи используем формулу :

$$\delta_l = -\frac{\pi m}{\hbar^2}\int_0^\infty dr\cdot r\cdot U(r)\cdot J_{l+1/2}^2(kr)\ .$$

При $l=0$ имеем дело с функцией Бесселя $J_{l+1/2} = J_{1/2}$. Ее явный вид такой:

$$J_{1/2}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}}\sin x\ .$$

Тогда $\delta_0 = -\frac{\pi m}{\hbar^2}\int_0^\infty dr\cdot r\cdot U(r)\cdot\frac{2}{\pi kr}\sin^2 kr$ или

$$\boxed{\delta_0 = -\frac{2m}{\hbar^2 k}\int_0^\infty dr\cdot U(r)\cdot\sin^2 kr}\ .$$

а) $U(r) = U_0 R\delta(r-R)$

$$\delta_0 = -\frac{2m}{\hbar^2 k}U_0 R\int_0^\infty dr\cdot\delta(r-R)\cdot\sin^2 kr = -\frac{2m}{\hbar^2 k}U_0 R\cdot\sin^2 kR\ .$$

б) $U(r) = U_0 e^{-r/R}$

$$\delta_0 = -\frac{2m}{\hbar^2 k}U_0\int_0^\infty dr\cdot e^{-r/R}\cdot\sin^2 kr = -\frac{2m}{\hbar^2 k}U_0 R\frac{2k^2R^2}{1+4k^2R^2} = -\frac{4mU_0}{\hbar^2}\frac{kR^3}{1+4k^2R^2}\ .$$

$$\left(\int_0^\infty dx\cdot e^{-x}\cdot\sin^2 tx = \left(\sin^2 tx = \frac{1}{2}(1-\cos 2tx)\right) = \frac{1}{2}\int_0^\infty dx\cdot e^{-x}(1-\cos 2tx) = \right.$$

$$\left. = \frac{1}{2} - \int_0^\infty dx\cdot e^{-x}\cos 2tx = \frac{1}{2} - \frac{1}{1+4t^2} = \frac{2t^2}{1+4t^2}\right).$$

Сечение рассеяния считается по формуле ЛЛ3 (122.11)

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^\infty(2l+1)\sin^2\delta_l\ .$$

При малых энергиях мало и значение δ_l, поэтому для $l=0$

$$\sigma \approx \frac{4\pi}{k^2}\delta_0^2\ .$$

Для случая а) $U(r) = U_0 R\delta(r-R)$ имеем $\delta_0 = -\frac{2m}{\hbar^2 k}U_0 R\cdot\sin^2 kR$, и при малых k получается

$$\sigma \approx \frac{4\pi}{k^2}\delta_0^2 \approx \frac{4\pi}{k^2}\frac{4m^2}{\hbar^4 k^2}U_0^2 R^2(kR)^4 = \frac{16\pi m^2 U_0^2 R^6}{\hbar^4}\ ,$$

что совпадает с формулой с учетом различия обозначений.

Для случая б) $U(r)=U_0e^{-r/R}$ имеем $\delta_0=-\frac{4mU_0}{\hbar^2}\frac{kR^3}{1+4k^2R^2}$, и при малых k получается

$$\sigma\approx\frac{4\pi}{k^2}\delta_0^2\approx\frac{4\pi}{k^2}\frac{16m^2U_0^2}{\hbar^4}k^2R^6=\frac{64\pi m^2U_0^2R^6}{\hbar^4},$$

что совпадает с формулой .

****

<u>(13.23)</u> Восстановить потенциал взаимодействия $U(r)$ по фазе рассеяния, считая ее известной при всех энергиях частицы и предполагая $\delta_0(k)=1$. В качестве иллюстрации рассмотреть зависимости $\delta_0(k)$ вида

а) $\delta_0(k)=const$; б) $\delta_0(k)=\alpha k\big/\left(1+\beta k^2\right)$;

В случае б) сравнить с результатом 13.22 б)

-

Формула , по сути, является интегральным преобразованием. Можно попытаться преобразовать ее так, чтобы она оказалась в точности преобразованием Фурье некой величины, в которую входит $U(r)$. Тогда можно было бы воспользоваться обратным преобразованием Фурье для восстановления исходного потенциала. Формула наиболее близка к синус-преобразованию Фурье, только степень при синусе равна 2 а нужна 1. Если переписать в виде

$$-\delta_0\frac{\hbar^2k}{2m}=\int_0^\infty dr\cdot U(r)\cdot\sin^2kr,$$

то, дифференцируя по k, можно добиться понижения степени.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d}{dk}\left[k\delta_0(k)\right]=\int_0^\infty dr\cdot r\cdot U(r)\cdot 2\sin kr\cos kr=\int_0^\infty dr\cdot r\cdot U(r)\cdot\sin 2kr.$$

Преобразования Фурье, прямое и обратное, имеют вид

$$F(u)=\int_{-\infty}^{\infty}f(t)\,e^{-iut}dt,\qquad f(t)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}F(u)\,e^{iut}du.$$

Для четной и нечетной функции $f(t)$ верно соответственно:

$$F(u)=\int_0^\infty f(t)\,\cos ut\,dt,\qquad f(t)=\frac{2}{\pi}\int_0^\infty F(u)\cos ut\,du.$$

$$F(u)=\int_0^\infty f(t)\,\sin ut\,dt,\qquad f(t)=\frac{2}{\pi}\int_0^\infty F(u)\sin ut\,du.$$

Можно доопределить $U(r)$ в области отрицательного аргумента как $U(r)=U(-r)$. Это не имеет физического смысла, однако позволит считать функцию $rU(r)$ нечетной, и, таким образом, формулу можно рассматривать как прямое синус-Фурье-преобразование величины $rU(r)$. Тогда через формулу обратного преобразования

$$rU(r)=-\frac{2}{\pi}\cdot\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^\infty\frac{d}{dk}\left[k\delta_0(k)\right]\cdot\sin 2kr\cdot d2k,$$

или

$$U(r) = -\frac{2\hbar^2}{\pi m}\frac{1}{r}\int_0^\infty \frac{d}{dk}\left[k\delta_0(k)\right]\cdot \sin 2kr\cdot dk .$$

а) $\delta_0(k) = const$;

$$U(r) = -\frac{2\hbar^2}{\pi m}\frac{1}{r}\int_0^\infty \delta_0 \cdot \sin 2kr\cdot dk \propto -\frac{2\hbar^2}{\pi m}\frac{1}{r}\delta_0 = -\frac{\alpha}{r} .$$

б) $\delta_0(k) = \alpha k \Big/ \left(1+\beta k^2\right)$;

$$U(r) = -\frac{2\hbar^2}{\pi m}\frac{1}{r}\int_0^\infty \frac{d}{dk}\frac{\alpha k^2}{1+\beta k^2}\cdot \sin 2kr\cdot dk = -\frac{2\hbar^2}{\pi m}\frac{1}{r}\int_0^\infty \frac{2\alpha k}{\left(1+\beta k^2\right)^2}\cdot \sin 2kr\cdot dk .$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{k}{\left(1+\beta k^2\right)^2}\cdot \sin kt\cdot dk = \frac{\pi t}{2\beta^{3/2}}\exp\left(-t\big/\sqrt{\beta}\right)$$

$$\int_0^\infty \frac{k}{\left(1+\beta k^2\right)^2}\cdot \sin 2kr\cdot dk = \frac{1}{2}\frac{\pi\cdot 2r}{2\beta^{3/2}}\exp\left(-2r\big/\sqrt{\beta}\right) = \frac{\pi r}{2\beta^{3/2}}\exp\left(-2r\big/\sqrt{\beta}\right)$$

$$U(r) = -\frac{2\hbar^2}{\pi m}\frac{2\alpha}{r}\frac{\pi r}{2\beta^{3/2}}\exp\left(-2r\big/\sqrt{\beta}\right) = -\frac{2\alpha\hbar^2}{m\beta^{3/2}}\exp\left(-2r\big/\sqrt{\beta}\right) \equiv U_0\exp\left(-r/R\right) .$$

Вычисление интеграла

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{k}{\left(1+\beta k^2\right)^2}\cdot \sin kt\cdot dk$$

Предположим $\beta > 0$. Особые точки $z_{1,2} = \frac{\pm i}{\sqrt{\beta}}$. Для подобных интегралов, где $P(x)$ – рациональная функция степени не выше –1, причем на действительной оси нет особых точек, имеется формула теории вычетов

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(x)\cdot \sin tx\cdot dx = 2\pi\,\mathrm{Re}\sum_{\mathrm{Im}\, z_i>0}\mathrm{Res}\, P(z)\cdot \exp(i tz) .$$

Посчитаем вычет в точке $z_0 = \frac{i}{\sqrt{\beta}}$.

Разложим в ряд Лорана подынтегральную функцию

$$\frac{z}{\left(1+\beta z^2\right)^2}\cdot \exp(izt) = \frac{\left(z_0+\varepsilon\right)}{\left(1+\beta\left(z_0+\varepsilon\right)^2\right)^2}\cdot \exp\left(i\left(z_0+\varepsilon\right)t\right) .$$

Рассмотрим отдельно знаменатель

$$\left(1+\beta\left(z_0+\varepsilon\right)^2\right)^{-2} = \left(\cancel{1}+\cancel{\beta z_0^2}+2\beta z_0\varepsilon+\beta\varepsilon^2\right)^{-2} = \left(\beta\varepsilon\right)^{-2}\left(2z_0+\varepsilon\right)^{-2} \cong$$

$$\cong \left(\beta\varepsilon\right)^{-2}\left(4z_0^2+4z_0\varepsilon\right)^{-1} = \frac{1}{\beta^2\varepsilon^2}\left(\frac{1}{4z_0^2}-\frac{4z_0\varepsilon}{16z_0^4}\right) = \frac{1}{\beta^2\varepsilon^2}\frac{1}{4z_0^2}\left(1-\frac{\varepsilon}{z_0}\right)$$

Точка $z_0 = i\big/\sqrt{\beta}$ – полюс второго порядка. Поэтому достаточно разложить все множители до степени 1, чтобы получить коэффициент при ε^{-1}.

$$\exp\left(i\left(z_0+\varepsilon\right)t\right) = \exp\left(iz_0t\right)\exp\left(i\varepsilon t\right) \cong \exp\left(iz_0t\right)\left(1+i\varepsilon t\right) .$$

$$\frac{(z_0+\varepsilon)}{\left(1+\beta(z_0+\varepsilon)^2\right)^2}\exp\left(i(z_0+\varepsilon)t\right) \cong (z_0+\varepsilon)\frac{1}{\beta^2\varepsilon^2}\frac{1}{4z_0^2}\left(1-\frac{\varepsilon}{z_0}\right)\exp(iz_0t)(1+i\varepsilon t) =$$

$$= \frac{1}{\varepsilon^2}\frac{\exp(iz_0t)}{\beta^2 4z_0^2}(z_0+\varepsilon)\left(1-\frac{\varepsilon}{z_0}\right)\cdot(1+i\varepsilon t) = \qquad .$$

$$= \frac{1}{\varepsilon^2}\cdot O\left(\varepsilon^0\right) + \frac{1}{\varepsilon^2}\cdot\varepsilon\cdot\frac{\exp(iz_0t)}{\beta^2 4z_0^2}\left(\cancel{1}-\cancel{\frac{z_0}{z_0}}+itz_0\right) + \frac{1}{\varepsilon^2}\cdot O\left(\varepsilon^2\right)$$

$$\operatorname*{Res}_{\frac{i}{\sqrt{\beta}}}\frac{(z_0+\varepsilon)}{\left(1+\beta(z_0+\varepsilon)^2\right)^2}\exp\left(i(z_0+\varepsilon)t\right) = \frac{\exp(iz_0t)}{\beta^2 4z_0^2}itz_0 = \frac{\exp(iz_0t)}{\beta^2 4z_0}it =$$

$$= \frac{\exp\left(i\frac{i}{\sqrt{\beta}}t\right)}{\beta^2 4\frac{i}{\sqrt{\beta}}}it = \frac{\exp\left(-\frac{t}{\sqrt{\beta}}\right)}{4\beta^{3/2}}t \qquad .$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{k}{\left(1+\beta k^2\right)^2}\cdot\sin kt\cdot dk = 2\pi\,\mathrm{Re}\left(\frac{t}{4\beta^{3/2}}\exp\left(-\frac{t}{\sqrt{\beta}}\right)\right) = \frac{\pi t}{2\beta^{3/2}}e^{-t/\sqrt{\beta}}$$

Тема 14: Формалізм парціальних хвиль.

Эта тема: решаем уравнение Шредингера $\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi+\left[E-U\left(\vec{r}\right)\right]\psi=0$. В центрально-симметричном поле (см. ЛЛIII §32.) U зависит только от длины радиус-вектора:

$$\Delta\psi+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-U\left(r\right)\right]\psi=0 .$$

С учетом вида лапласиана в сферических координатах

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial\psi}{\partial\vartheta}\right)+\frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right]+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-U\left(r\right)\right]\psi=0 .$$

Волновая функция ищется в виде произведения двух множителей: радиального и углового

$$\psi=R\left(r\right)Y\left(\vartheta,\varphi\right) .$$

Система производных по углам представляется в виде оператора $\hat{l}^2$

$$\hat{l}^2\equiv-\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right)-\frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} .$$

Учитывая и то, что собственные значения $\hat{l}^2$ имеют вид

$$\hat{l}^2Y_{lm}=l\left(l+1\right)Y_{lm} ,$$

переписываем относительно только радиальной части:

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)-\frac{1}{r^2}l\left(l+1\right)R+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-U\left(r\right)\right]R=0 .$$

Заменой $R=\frac{\chi}{r}$ уравнение преобразуется

$$\left(\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\frac{\chi}{r}\right)=\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r\chi'-\chi\right)=\frac{1}{r^2}\left(\chi'+r\chi''-\chi'\right)=\frac{\chi''}{r}\right).$$

$$\chi''+\left[\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-U\left(r\right)\right)-\frac{l\left(l+1\right)}{r^2}\right]\chi=0 .$$

При $l=0$ оно имеет вид

$$\chi''+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-U\left(r\right)\right)\chi=0 .$$

****

<u>(13.24)</u> Найти точные значения фазовых сдвигов s-волн в полях:

а) $U\left(r\right)=\begin{cases}\infty, & r<R\\ 0, & r>R\end{cases}$, б) $U\left(r\right)=\begin{cases}-U_0, & r<R\\ 0, & r>R\end{cases}$, в) $U\left(r\right)=-U_0e^{-r/R}$

используя полученные результаты, найти сечения рассеяния для медленных частиц. Указать условия применимости полученных выражений.

а) $U\left(r\right)=\begin{cases}\infty, & r<R\\ 0, & r>R\end{cases}$

при $r>R$ уравнение имеет вид $\left(\frac{2m}{\hbar^2}E=k^2\right)$

$$\chi''+k^2\chi=0 .$$

Его решение выглядит как

$$\chi\left(r\right)=A\sin\left(kr+\delta_0\right) .$$

Из граничного условия $\chi(R)=0$ вытекает

$$\delta_0=-kR\,.$$

б) $U(r)=\begin{cases}-U_0, & r<R\\ 0, & r>R\end{cases}$

Здесь уравнение аналогично предыдущему, только в разных областях имеются разные константы при χ .

$$\begin{cases}\chi''+\dfrac{2m}{\hbar^2}\left(E+U_0\right)\chi=0, & r<R\\ \chi''+k^2\chi=0, & r>R\end{cases}.$$

Получаем два решения (первое подчиняется граничному условию $\chi(0)=0$).

$$\begin{cases}\chi=A\sin\kappa r, & r<R\\ \chi=B\sin\left(kr+\delta_0\right), & r>R\end{cases}.$$

Здесь

$$\kappa^2=\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+U_0\right).$$

Эти два решения необходимо сшить в точке $r=R$. Сшиваются сами функции χ и их первые производные. Получается

$$\begin{cases}A\sin\kappa R=B\sin\left(kR+\delta_0\right)\\ A\kappa\cos\kappa R=Bk\cos\left(kR+\delta_0\right)\end{cases}.$$

Делим второе на первое и получаем

$$\begin{gathered}k\,\mathrm{ctg}\left(kR+\delta_0\right)=\kappa\,\mathrm{ctg}\,\kappa R \quad\rightarrow\quad \mathrm{ctg}\left(kR+\delta_0\right)=\frac{\kappa}{k}\mathrm{ctg}\,\kappa R \;\rightarrow\\ \rightarrow\quad \delta_0=\mathrm{arcctg}\left(\frac{\kappa}{k}\mathrm{ctg}\,\kappa R\right)-kR\end{gathered}.$$

в) $U(r)=-U_0e^{-r/R}$

Здесь пригодится замена $x=e^{-r/2R}$. Уравнение преобразуется к уравнению Бесселя:

$$\chi''+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+U_0e^{-r/R}\right)\chi=0\,.$$

$$x=e^{-r/2R}\;\rightarrow\; dx=\frac{-1}{2R}e^{-r/2R}dr\;\rightarrow\; dr=-\frac{2R}{x}dx\,.$$

$$+\frac{1}{\left(2R\right)^2}x\frac{d}{dx}x\frac{d}{dx}\chi+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+U_0x^2\right)\chi=0\,.$$

$$x^2\chi''_x+x\chi'_x+\frac{4mR^2E}{\hbar^2}\chi+\frac{4mR^2U_0}{\hbar^2}x^2\chi=0\,.$$

$$\lambda^2\equiv\frac{8mR^2U_0}{\hbar^2},\qquad q^2\equiv\frac{8mR^2E}{\hbar^2}=\left(2kR\right)^2.$$

$$\chi''+\frac{\chi'}{x}+q^2\frac{\chi}{x^2}+\lambda^2\chi=0\,.$$

$$\chi''+\frac{\chi'}{x}+\left(\lambda^2-\frac{\left(iq\right)^2}{x^2}\right)\chi=0\,.$$

Решением уравнения является комбинация функций Бесселя

$$\chi = C_1 J_{iq}(\lambda x) + C_2 J_{-iq}(\lambda x).$$

Имеется граничное условие $\chi(r=0) \Leftrightarrow \chi(x=1)=0$. Тогда становится на одну свободную константу меньше, и решение с учетом этого условия можно записать $\chi(x)$ в виде

$$\chi(x) = A\Big(J_{-iq}(\lambda)\,J_{iq}(\lambda x) - J_{iq}(\lambda)\,J_{-iq}(\lambda x)\Big).$$

Фазовый сдвиг можно найти, используя вид волновой функции на большом расстоянии. Она имеет асимптотику

$$\chi \underset{r\to\infty}{\propto} \sin(kr+\delta_0) = \frac{1}{2i}\left(e^{ikr+\delta_0} - e^{-ikr-\delta_0}\right) = \frac{1}{2i}\left(x^{-2ikR}e^{i\delta_0} - x^{2ikR}e^{-i\delta_0}\right) =$$
$$= \frac{1}{2i}\left(x^{-iq}e^{i\delta_0} - x^{iq}e^{-i\delta_0}\right)$$

Большие расстояния соответствуют малым x (то есть малым аргументам функций Бесселя в), функции Бесселя имеют такие асимптотики при малых аргументах

$$J_\nu(x) \approx \frac{1}{\Gamma(1+\nu)}\left(\frac{x}{2}\right)^\nu.$$

Тогда

$$\chi \approx A\left[\frac{J_{-iq}(\lambda)}{\Gamma(1+iq)}\left(\frac{\lambda x}{2}\right)^{iq} - \frac{J_{iq}(\lambda)}{\Gamma(1-iq)}\left(\frac{\lambda x}{2}\right)^{-iq}\right] =$$
$$= A\left[\frac{J_{-iq}(\lambda)}{\Gamma(1+iq)}\left(\frac{\lambda}{2}\right)^{iq} x^{iq} - \frac{J_{iq}(\lambda)}{\Gamma(1-iq)}\left(\frac{\lambda}{2}\right)^{-iq} x^{-iq}\right].$$

Учитывая то, что в мы имеем волновую функцию с точностью до не определенного еще множителя, формулы и можно приравнять друг к другу только переопределив $A \to A'$ из . Тогда, сравнивая множители при $x^{\pm iq}$ в и , выражаем

$$e^{i\delta_0} = A'\frac{J_{iq}(\lambda)}{\Gamma(1-iq)}\left(\frac{\lambda}{2}\right)^{-iq}, \qquad e^{-i\delta_0} = A'\frac{J_{-iq}(\lambda)}{\Gamma(1+iq)}\left(\frac{\lambda}{2}\right)^{iq},$$

$$e^{2i\delta_0} = \frac{e^{2i\delta_0}}{e^{-2i\delta_0}} = \frac{\cancel{A'}}{\cancel{A'}}\frac{\Gamma(1+iq)\,J_{iq}(\lambda)\cdot(\lambda/2)^{-iq}}{\Gamma(1-iq)\,J_{-iq}(\lambda)\cdot(\lambda/2)^{iq}}.$$

Сечение рассеяния: ищется по формуле

$$\sigma \approx \frac{4\pi}{k^2}\delta_0^2.$$

Таким образом, для медленных частиц необходимо разложить полученные выражения для δ_0 по малому k.

а) $\delta_0 = -kR$

получаем

$$\sigma \approx \frac{4\pi}{k^2}(-kR)^2 = 4\pi R^2.$$

а) $\delta_0 = \operatorname{arcctg}\left(\frac{\kappa}{k}\operatorname{ctg}\kappa R\right) - kR$

сначала получим разложение δ_0 по k. Выражение $\frac{\kappa}{k}\operatorname{ctg}\kappa R$, аргумент арккотангенса, велико при малых k. Выпишем разложение $\operatorname{arcctg}\frac{1}{x}$:

$$\operatorname{arcctg}\left(\frac{1}{x}\right) = x - \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{5} - \dots .$$

Тогда можно представить

$$\operatorname{arcctg}\left(\frac{\kappa}{k}\operatorname{ctg}\kappa R\right) = \operatorname{arcctg}\left(\frac{1}{\frac{k}{\kappa}\operatorname{tg}\kappa R}\right).$$

Величина $\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left(E + U_0\right)} = \sqrt{k^2 + \frac{2m}{\hbar^2}U_0}$ квадратична по k, поэтому ее можно представить равной κ_0

$$\kappa \approx \kappa_0 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}U_0} .$$

Таким образом, получаем

$$\delta_0 = \operatorname{arcctg}\left(\frac{\kappa}{k}\operatorname{ctg}\kappa R\right) - kR \approx \operatorname{arcctg}\left(\frac{1}{\frac{k}{\kappa}\operatorname{tg}\kappa R}\right) - kR \approx .$$

$$\approx \frac{k}{\kappa_0}\operatorname{tg}\kappa_0 R - kR = k\left(\frac{1}{\kappa_0}\operatorname{tg}\kappa_0 R - R\right)$$

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\delta_0^2 = \frac{4\pi}{\cancel{k^2}}\cancel{k^2}\left(\frac{1}{\kappa_0}\operatorname{tg}\kappa_0 R - R\right)^2 .$$

Если $U_0 < 0$: тогда $\kappa \approx \kappa_0 = i\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left|U_0\right|}$. Необходимо учесть $\operatorname{tg} ix = i \operatorname{th} x$. Получается

$$\sigma = 4\pi\left(\frac{i}{i\kappa_0}\operatorname{th}\kappa_0 R - R\right)^2 .$$

Здесь уже $\kappa_0 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left|U_0\right|}$.

в)

$$e^{2i\delta_0} = \frac{e^{2i\delta_0}}{e^{-2i\delta_0}} = \frac{\Gamma\left(1+iq\right) J_{iq}\left(\lambda\right)\cdot\left(\lambda/2\right)^{-iq}}{\Gamma\left(1-iq\right) J_{-iq}\left(\lambda\right)\cdot\left(\lambda/2\right)^{iq}} .$$

$$\lambda^2 \equiv \frac{8mR^2U_0}{\hbar^2}, \qquad q^2 \equiv \frac{8mR^2E}{\hbar^2} = \left(2kR\right)^2 \to q = 2kR .$$

$$\Gamma'\left(1\right) = -\mathbf{C} = -0.577\dots .$$

$$x^\alpha = e^{\alpha \ln x} .$$

$$\left.\frac{\partial J_\nu\left(z\right)}{\partial \nu}\right|_{\nu=0} = \frac{\pi}{2}N_0\left(z\right) .$$

Используя вышенаписанные формулы, разлагаем все функции в по малому q: Гамма-функцию в ряд по аргументу, а функцию Бесселя – в ряд Тейлора по ее порядку (порядок меняется непрерывно, и он может рассматриваться как еще один аргумент функции Бесселя)

$$\Gamma(1\pm iq)=\Gamma(1)\pm iq\Gamma'(1)=\Gamma(1)\mp iq\mathbf{C}\,.$$

$$J_{\pm iq}(\lambda)=J_0(\lambda)\pm iq\left.\frac{\partial J_\nu(\lambda)}{\partial\nu}\right|_{\nu=0}=J_0(\lambda)\pm iq\frac{\pi}{2}N_0(\lambda)\,.$$

$$\left(\frac{\lambda}{2}\right)^{\pm iq}=e^{\pm iq\ln\frac{\lambda}{2}}\approx 1\pm iq\ln\frac{\lambda}{2}\,.$$

$$e^{2i\delta_0}\approx 1+2i\delta_0\,.$$

В следующей формуле верхний знак соответствует числителю, а нижний – знаменателю дроби :

$$\Gamma(1\pm iq)\,J_{\pm iq}(\lambda)\cdot(\lambda/2)^{\mp iq}\approx(1\mp i\mathbf{C}q)\left(J_0(\lambda)\pm\frac{i\pi}{2}N_0(\lambda)\,q\right)\left(1\mp iq\ln\frac{\lambda}{2}\right)\approx$$
$$\approx J_0(\lambda)+iq\left(\pm\frac{\pi}{2}N_0(\lambda)\mp J_0(\lambda)\,\mathbf{C}\mp J_0(\lambda)\ln\frac{\lambda}{2}\right).$$

Отдельно разложение знаменателя:

$$\frac{1}{\Gamma(1-iq)\,J_{-iq}(\lambda)\cdot(\lambda/2)^{+iq}}\approx\left\{J_0(\lambda)+iq\left(-\frac{\pi}{2}N_0(\lambda)+J_0(\lambda)\,\mathbf{C}+J_0(\lambda)\ln\frac{\lambda}{2}\right)\right\}^{-1}\approx$$
$$\approx\frac{1}{J_0(\lambda)}-iq\frac{1}{J_0^2(\lambda)}\left(-\frac{\pi}{2}N_0(\lambda)+J_0(\lambda)\,\mathbf{C}+J_0(\lambda)\ln\frac{\lambda}{2}\right)=$$
$$=\frac{1}{J_0(\lambda)}-iq\left(-\frac{\pi}{2}\frac{N_0(\lambda)}{J_0^2(\lambda)}+\frac{1}{J_0^1(\lambda)}\mathbf{C}+\frac{1}{J_0(\lambda)}\ln\frac{\lambda}{2}\right).$$

$$\frac{\Gamma(1+iq)\,J_{iq}(\lambda)\cdot(\lambda/2)^{-iq}}{\Gamma(1-iq)\,J_{-iq}(\lambda)\cdot(\lambda/2)^{iq}}\approx$$
$$\approx\left[J_0(\lambda)+iq\left(\frac{\pi}{2}N_0(\lambda)-J_0(\lambda)\,\mathbf{C}-J_0(\lambda)\ln\frac{\lambda}{2}\right)\right]\cdot$$
$$\cdot\left[\frac{1}{J_0(\lambda)}-iq\left(-\frac{\pi}{2}\frac{N_0(\lambda)}{J_0^2(\lambda)}+\frac{1}{J_0(\lambda)}\mathbf{C}+\frac{1}{J_0(\lambda)}\ln\frac{\lambda}{2}\right)\right]\approx$$
$$\approx 1+iq\left(2\frac{\pi}{2}\frac{N_0(\lambda)}{J_0(\lambda)}-2\frac{J_0(\lambda)}{J_0(\lambda)}\mathbf{C}-2\frac{J_0(\lambda)}{J_0(\lambda)}\ln\frac{\lambda}{2}\right)=1+iq\left(\pi\frac{N_0(\lambda)}{J_0(\lambda)}-2\mathbf{C}-2\ln\frac{\lambda}{2}\right)$$

$$1+2i\delta_0=1+iq\left(\pi\frac{N_0(\lambda)}{J_0(\lambda)}-2\mathbf{C}-2\ln\frac{\lambda}{2}\right)=1+2ikR\left(\pi\frac{N_0(\lambda)}{J_0(\lambda)}-2\mathbf{C}-2\ln\frac{\lambda}{2}\right).$$

$$\delta_0=2kR\left(\frac{\pi}{2}\frac{N_0(\lambda)}{J_0(\lambda)}-\mathbf{C}-\ln\frac{\lambda}{2}\right).$$

$$\sigma\approx\frac{4\pi}{k^2}\delta_0^2=\frac{4\pi}{k^2}\cdot 4k^2R^2\left(\frac{\pi}{2}\frac{N_0(\lambda)}{J_0(\lambda)}-\mathbf{C}-\ln\frac{\lambda}{2}\right)^2=16\pi R^2\left(\frac{\pi}{2}\frac{N_0(\lambda)}{J_0(\lambda)}-\mathbf{C}-\ln\frac{\lambda}{2}\right)^2.$$

Тема 15: Розсіяння електронів атомами водню.

****

(XX.YY) вычислить дифференциальное и интегральное сечения упругого рассеяния быстрых электронов атомами водорода, находящимися в основном состоянии (задача к §137 ЛЛIII, также учебник Ю.Бережного стр. 392).

\---
\-

Необходимо знать волновую функцию нормального состояния атома водорода. Далее с ее помощью записывается форм-фактор, а затем и дифференциальное сечение.
Волновая функция нормального состояния атома водорода имеет вид

$$\boxed{\psi = e^{-ir/a_0} \Big/ \sqrt{\pi a_0^3}} \, .$$

Здесь $\boxed{a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}}$ – первый Боровский радиус. Тогда n имеет вид

$$n = |\psi|^2 = e^{-2ir/a_0} \Big/ \left(\pi a_0^3\right).$$

Сечения рассеяния выражаются через форм-фактор – величину, имеющую вид

$$\boxed{F(\vec q) \equiv \int_0^\infty d^3 r \cdot n(\vec r) \exp(i\vec q \vec r)} \, .$$

Вектор $\vec q = \vec k - \vec k'$ – переданный импульс. Угол между $\vec q$ и $\vec r$ оказывается углом, по которому производится интегрирование. Таким образом, для форм-фактора получаем

$$F(\vec q) = \frac{1}{\pi a_0^3} \int d\varphi \cdot r^2 dr \cdot e^{-2r/a_0} \cdot \sin\theta d\theta \cdot \exp(i\vec q \vec r) =$$

$$= -\frac{2\pi}{\pi a_0^3} \int r^2 dr \cdot e^{-2r/a_0} \cdot d\cos\theta \cdot \exp(iqr\cos\theta) =$$

$$= -\frac{2}{a_0^3} \int \frac{1}{iqr} r^2 dr \cdot e^{-2r/a_0} \cdot \int_{\theta=0}^{\theta=\pi} d(iqr\cos\theta) \cdot \exp(iqr\cos\theta) =$$

$$= +\frac{2}{a_0^3} \int \frac{1}{iqr} r^2 dr \cdot e^{-2r/a_0} \cdot \int_{\substack{\theta=\pi \\ x=-iqr}}^{\substack{\theta=0 \\ x=iqr}} dx \cdot \exp(x) = \frac{2}{a_0^3} \int_0^\infty \frac{1}{iqr} r^2 dr \cdot e^{-2r/a_0} \cdot 2i \frac{e^{iqr} - e^{-iqr}}{2i} =$$

$$= \frac{4}{a_0^3} \frac{1}{q} \int_0^\infty r dr \cdot e^{-2r/a_0} \cdot \sin qr = \frac{a_0^2}{a_0^3 q} \int_0^\infty \frac{2r}{a_0} d\frac{2r}{a_0} \cdot e^{-2r/a_0} \cdot \sin \frac{2r}{a_0} \cdot \frac{a_0 q}{2} =$$

$$= \left[t \equiv \frac{a_0 q}{2} \right] = \frac{a_0^2}{a_0^3 q} \int_0^\infty dx \cdot x \cdot e^{-x} \cdot \sin tx = \left[\int_0^\infty dx \cdot x \cdot e^{-x} \cdot \sin tx = \frac{2t}{\left(1+t^2\right)^2} \right] =$$

$$= \frac{1}{a_0 q} \frac{2\frac{a_0 q}{2}}{\left(1 + \left(\frac{a_0 q}{2}\right)^2\right)^2} = \frac{1}{\left(1 + \frac{a_0^2 q^2}{4}\right)^2}$$

Для дифференциального сечения получаем

$$d\sigma = \frac{4}{a_0^2 q^4}\left(Z - F\left(q\right)\right)^2 do = \frac{4}{a_0^2 q^4}\left(1 - \frac{1}{\left(1 + \frac{a_0^2 q^2}{4}\right)^2}\right)^2 do =$$

$$= \frac{4}{a_0^2 q^4}\left(1 - \left(\frac{4}{4 + a_0^2 q^2}\right)^2\right)^2 do = \frac{4}{a_0^2 q^4}\left(1 - \frac{16}{16 + 8a_0^2 q^2 + a_0^4 q^4}\right)^2 do =$$

$$= \frac{4}{a_0^2 q^4}\left(a_0^2 q^2 \frac{8 + a_0^2 q^2}{\left(4 + a_0^2 q^2\right)^2}\right)^2 do = \frac{4}{a_0^2 \cancel{q^4}} a_0^4 \cancel{q^4} \frac{\left(8 + a_0^2 q^2\right)^2}{\left(4 + a_0^2 q^2\right)^4} do =$$

$$= 4a_0^2 \frac{\left(8 + a_0^2 q^2\right)^2}{\left(4 + a_0^2 q^2\right)^4} do$$

$$d\sigma = 4a_0^2 \frac{\left(8 + a_0^2 q^2\right)^2}{\left(4 + a_0^2 q^2\right)^4} do .$$

Был вопрос: как интегрировать по углам рассеяния, считать при этом k малым или большим. Ответ: для быстрых частиц считать его большим и честно считать интеграл. См. вычисление абзацем ниже после звездочки*. Этот вариант рассмотрен в Ландау-Лифшиц. *Если электрон медленный, проинтегрировать* $d\sigma$ *можно, пренебрегая зависимостью* q *от углов и пренебрегая самим* q. *Тогда интегрирование сводится к умножению на* 4π *(интеграл по телесному углу).*

$$\sigma = 4a_0^2 \frac{64}{256} \cdot 4\pi = 4\pi a_0^2 .$$

*Однако данная задача о быстрых частицах, поэтому необходимо интегрировать по углу рассеяния α, учитывая то, что k велико.

$$do = 2\pi \sin\alpha d\alpha,$$

$$q = 2k \sin\alpha/2$$

Учитывая связь q и α, переходим к интегрированию по q:

$$do = 2\pi \sin\alpha d\alpha = 2\pi \cdot 2\sin\left(\alpha/2\right)\cos\left(\alpha/2\right) d\alpha = 2\pi \cdot 4\sin\left(\alpha/2\right) d\sin\left(\alpha/2\right) =$$

$$= 8\pi \sin\left(\alpha/2\right) d\sin\left(\alpha/2\right) = \left[\sin\left(\alpha/2\right) = \frac{q}{2k}\right] = 8\pi \frac{q}{2k} d\frac{q}{2k} = \frac{2\pi}{k^2} q dq$$

$$d\sigma = 4a_0^2 \frac{\left(8 + a_0^2 q^2\right)^2}{\left(4 + a_0^2 q^2\right)^4} \frac{2\pi}{k^2} q dq = \frac{8\pi a_0^2}{k^2} \frac{\left(8 + a_0^2 q^2\right)^2}{\left(4 + a_0^2 q^2\right)^4} \frac{dq^2}{2} = \frac{4\pi a_0^2}{k^2} \frac{\left(8 + a_0^2 q^2\right)^2}{\left(4 + a_0^2 q^2\right)^4} dq^2$$

$$\alpha \in \left[0, \pi\right]; \qquad q \in \left[0, 2k\right]; \qquad q^2 \in \left[0, 4k^2\right]$$

$$d\sigma = \frac{4\pi a_0^2}{k^2} \frac{\left(8 + a_0^2 q^2\right)^2}{\left(4 + a_0^2 q^2\right)^4} dq^2 = \left[q^2 \in \left[0, 4k^2\right]\right] = \frac{4\pi a_0^2}{k^2} \frac{\left(8 + a_0^2 x\right)^2}{\left(4 + a_0^2 x\right)^4} dx$$

$$\sigma=\frac{4\pi a_0^2}{k^2}\int\limits_0^{4k^2}\frac{\left(8+a_0^2x\right)^2}{\left(4+a_0^2x\right)^4}dx=\frac{4\pi a_0^2}{k^2}\frac{1}{a_0^2}\int\limits_0^{4a_0^2k^2}\frac{\left(8+y\right)^2}{\left(4+y\right)^4}dy=$$

$$=\left\{\int\limits_0^{4a_0^2k^2}\frac{\left(8+y\right)^2}{\left(4+y\right)^4}dy\Bigg|_{4a_0^2k^2 ?\ 1}\approx\frac{7}{12}\right\}=\frac{4\pi}{k^2}\frac{7}{12}=\frac{7\pi}{3k^2}$$

Вычисление интеграла с учетом $4a_0^2k^2\equiv t ?\ 1$:

$$\int\limits_0^t\frac{\left(8+y\right)^2}{\left(4+y\right)^4}dy=\int\limits_0^t\frac{\left(4+4+y\right)^2}{\left(4+y\right)^4}d\left(4+y\right)=\int\limits_4^{4+t}\frac{\left(4+x\right)^2}{x^4}dx=16\int\limits_4^{4+t}\frac{dx}{x^4}+8\int\limits_4^{4+t}\frac{dx}{x^3}+\int\limits_4^{4+t}\frac{dx}{x^2}=$$

$$=+\frac{16}{3}\frac{1}{x^3}\Bigg|_{4+t}^{4}+\frac{4}{x^2}\Bigg|_{4+t}^{4}+\frac{1}{x}\Bigg|_{4+t}^{4}=\frac{16}{3}\left(\frac{1}{4^3}-\cancel{\frac{1}{\left(4+t\right)^3}}\right)+4\left(\frac{1}{4^2}-\cancel{\frac{1}{\left(4+t\right)^2}}\right)+\left(\frac{1}{4}-\cancel{\frac{1}{4+t}}\right)\approx$$

$$\approx\frac{16}{3}\frac{1}{4^3}+4\frac{1}{4^2}+\frac{1}{4}=\frac{7}{12}$$