Квантовая Теория

2021 г.

Запрягаев Сергей Александрович

Квантовая Теория
2021 г.
Запрягаев Сергей Александрович

Часть 3.

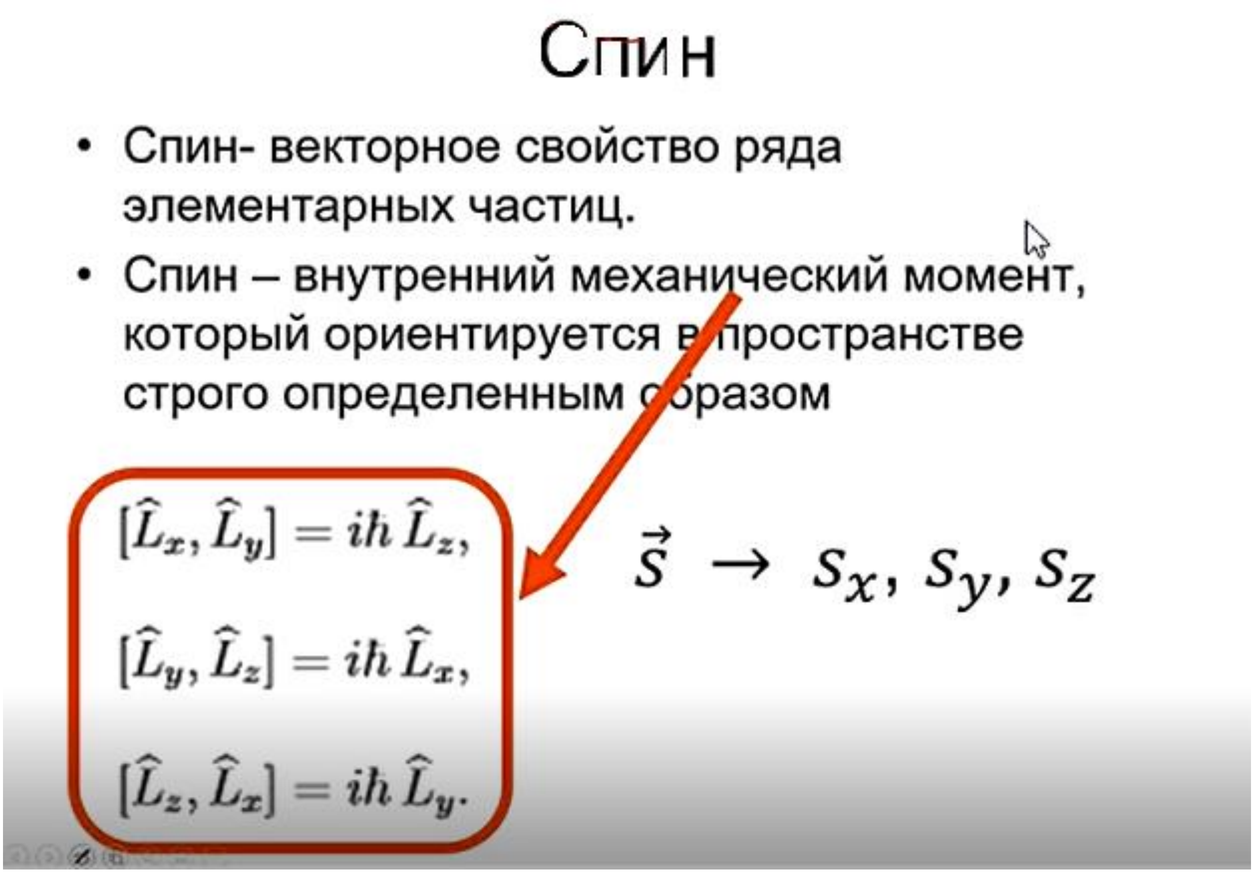
Часть 3.

Проблемы квантовой теории Шредингера

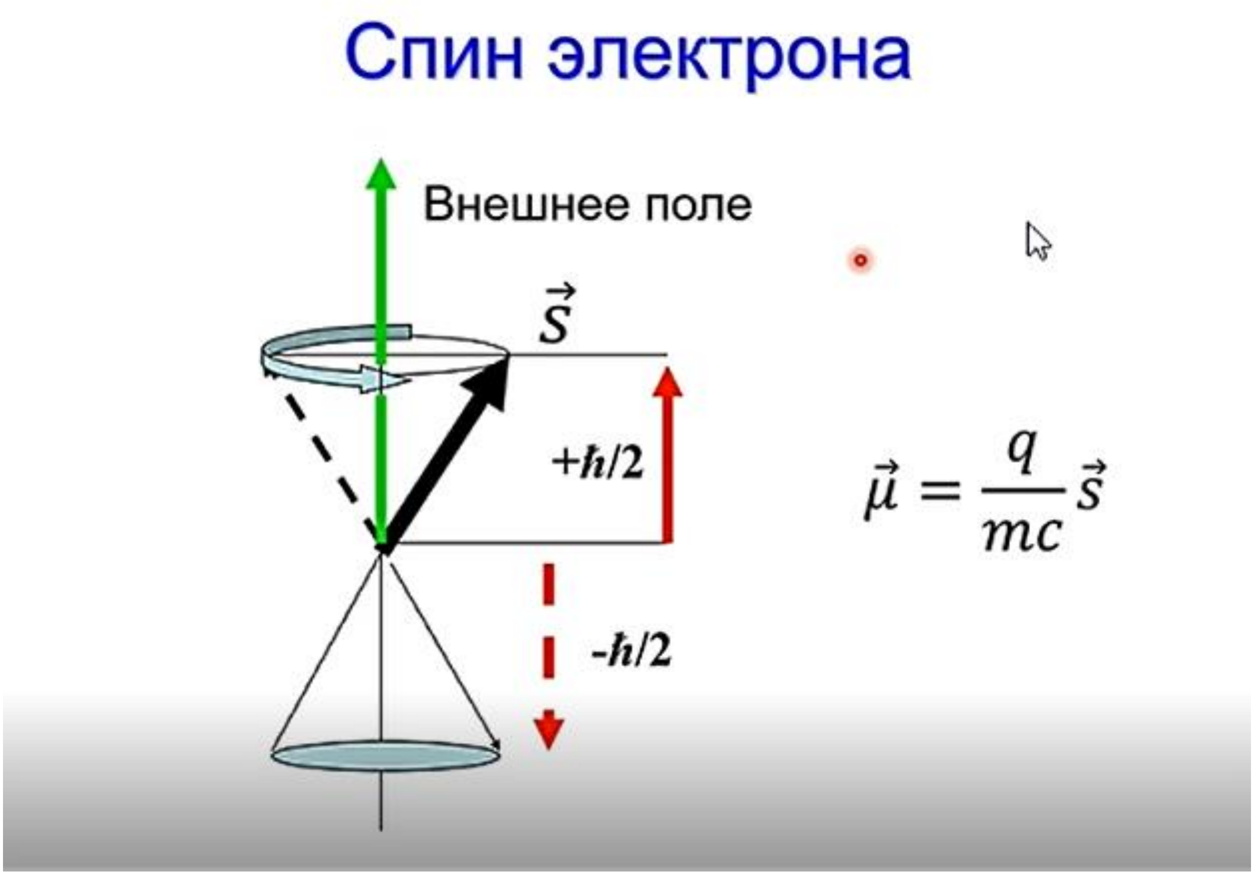
- Тонкая структура оптических спектров атомов
- Эффект Зеемана
- Опыты Штерна-Герлаха

Проблемы квантовой теории Шредингера

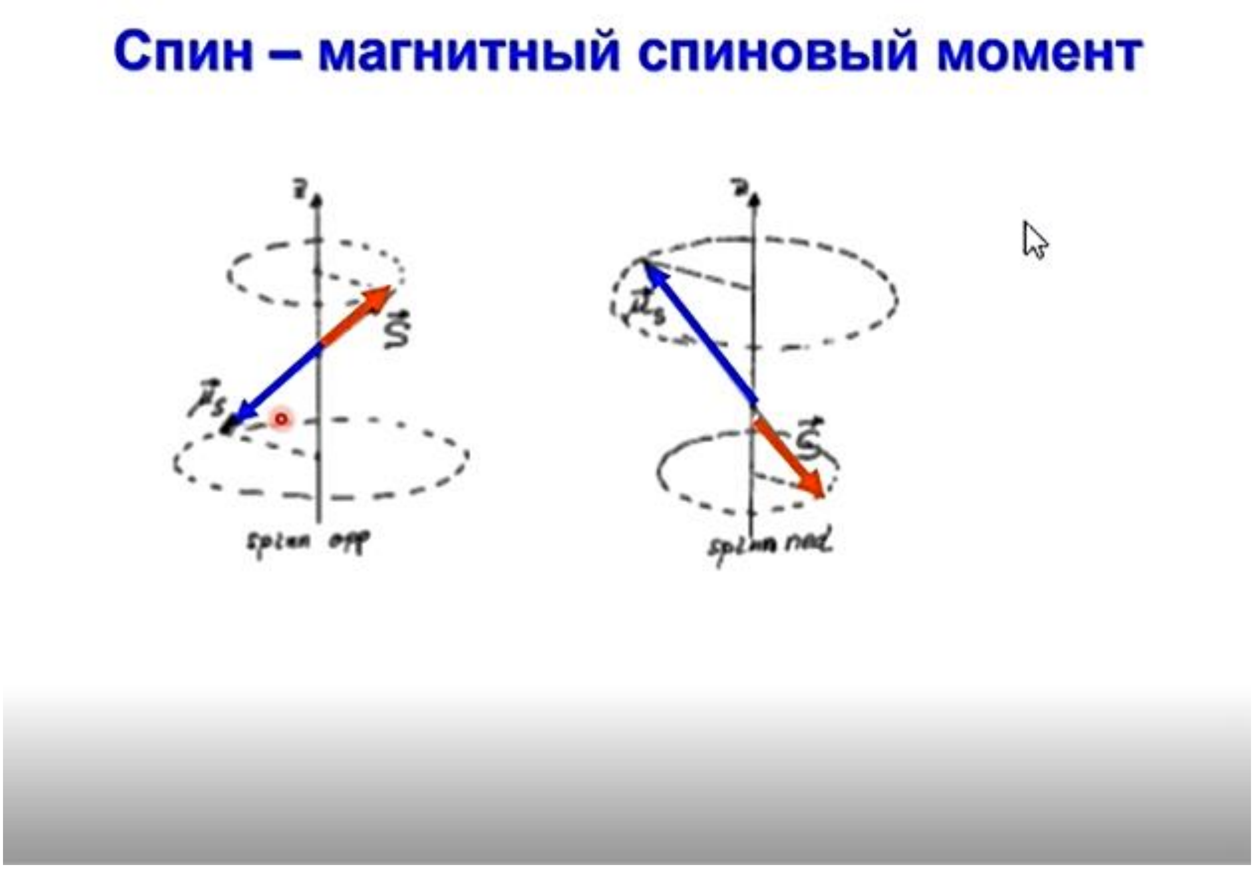
Тонкая структура оптических спектров
атомов
Эффект Зеемана
Опыты Штерна-Герлаха



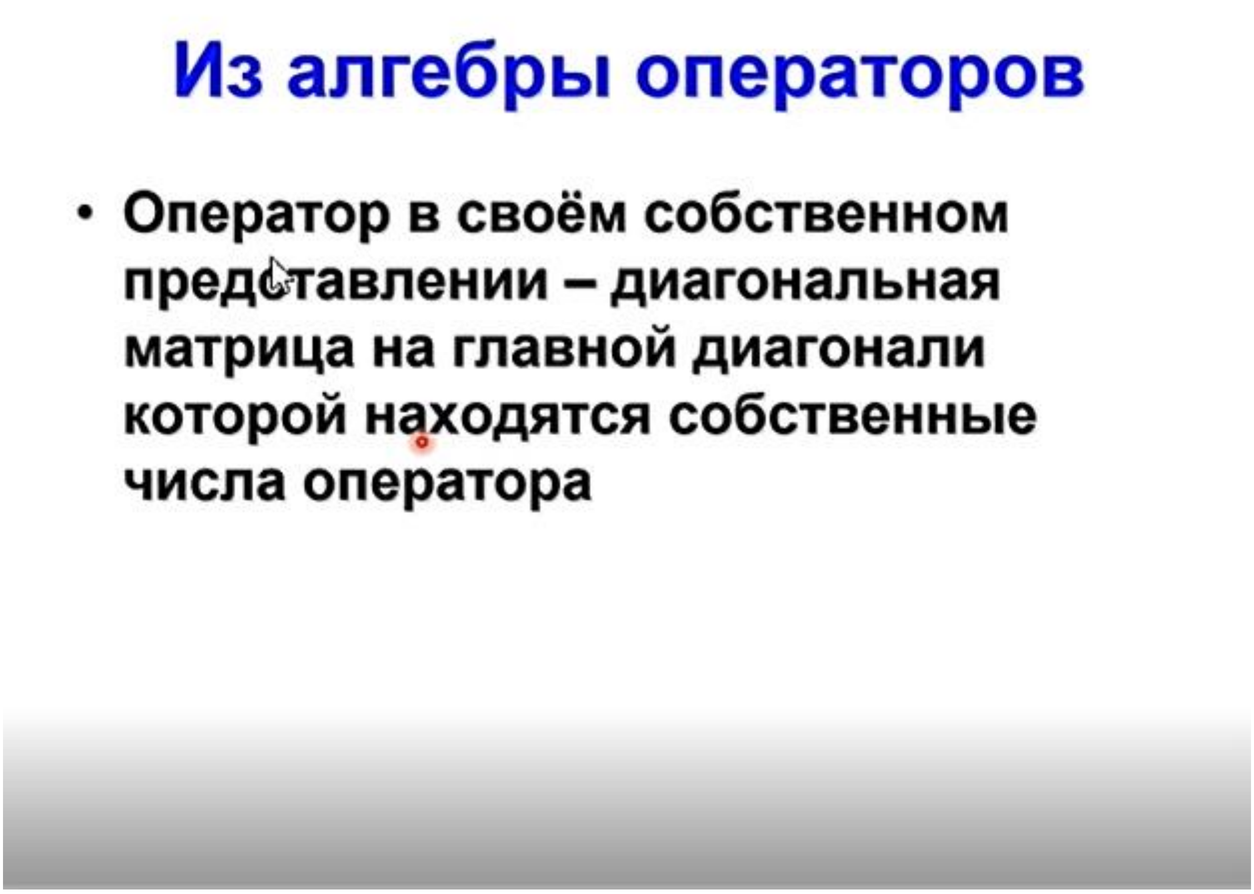
Спин
Спин- векторное свойство ряда
элементарных частиц.
Спин – внутренний механический момент,
который ориентируется в пространстве
строго определенным образом



Спин электрона
Внешнее поле



Спин – магнитный спиновый момент



Из алгебры операторов
Оператор в своём собственном
представлении – диагональная матрица на главной диагонали
которой находятся собственные
числа оператора

Из алгебры операторов

$$|A\rangle = \hat{S}\,|B\rangle \qquad \hat{F}\,|n\rangle = f_n\,|n\rangle\,, \quad n = 1, 2\ldots$$

$$|A\rangle = \sum_n a_n\,|n\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n\,|A\rangle$$

$$|B\rangle = \sum_n b_n\,|n\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n\,|B\rangle$$

$$\langle m\,|A\rangle = \sum_n \langle m|\,\hat{S}\,|\,n\rangle\langle n\,|B\rangle, \quad m, n \in 1, 2\ldots$$

$$\begin{pmatrix} \langle 1\,|A\rangle \\ \langle 2\,|A\rangle \\ \vdots \\ \langle k\,|A\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & \ldots \\ S_{21} & S_{22} & \ldots & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ S_{k1} & S_{k2} & \ldots & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle 1\,|B\rangle \\ \langle 2\,|B\rangle \\ \vdots \\ \langle k\,|B\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Из алгебры операторов

Из алгебры операторов

$$\langle m\,|A\rangle = \sum_n \langle m|\,\hat{S}\,|\,n\rangle\langle n\,|B\rangle, \quad m, n \in 1, 2\ldots$$

$$\langle m|\,\hat{S}\,|\,n\rangle \equiv \langle m|\,\hat{F}\,|\,n\rangle = f_n\langle m\,|n\rangle = f_n\delta_{nm}.$$

$$\begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & \ldots \\ S_{21} & S_{22} & \ldots & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ S_{k1} & S_{k2} & \ldots & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \end{pmatrix} \longrightarrow \hat{F} \to \begin{pmatrix} f_1 & 0 & 0 & \ldots \\ 0 & f_2 & 0 & \ldots \\ 0 & 0 & f_3 & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \end{pmatrix}$$

Из алгебры операторов

Оператор спина

$$\hat{s}_z = \begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{s}_x = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}; \quad \hat{s}_y = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}$$

$$[\,\hat{s}_j, \hat{s}_k\,] = i\hbar\varepsilon_{jkl}\hat{s}_l, \quad j,k,l = 1,2,3.$$

$$\hat{s}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{s}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Оператор спина

Матрицы Паули

$$\mathrm{s} = \hbar/2\,\hat{\sigma}.$$

$$\sigma_x \equiv \sigma_1, \sigma_y \equiv \sigma_2, \sigma_z \equiv \sigma_3.$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_k^2 = I; \quad \mathrm{Sp}\sigma_i = 0;$$

$$det\|\sigma_j\| = -1, \quad j = 1,2,3;$$

$$\sigma_j^2 = I, \qquad j = 1,2,3;$$

$$A = \lambda_0 I + \sum_{k=1}^{3} \lambda_k \sigma_k,$$

$$\sigma_x\sigma_y\sigma_z = i\,I$$

Матрицы Паули

Собственные функции оператора спина

$$\frac{\hbar}{2}\sigma_z\langle s_z|\lambda\rangle = \lambda\langle s_z|\lambda\rangle \qquad \lambda = \pm\hbar/2,$$

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}_\lambda = \lambda\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}_\lambda,$$

$$\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}_{\lambda=+\hbar/2} = \begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}_{\lambda=-\hbar/2} = \begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix}.$$

$$|0\rangle \equiv |\uparrow\rangle \equiv \alpha \equiv \begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix} \qquad |1\rangle \equiv |\downarrow\rangle \equiv \beta \equiv \begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix}$$

Собственные функции оператора спина

Уравнение Паули

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_{\text{Паули}}(q,t) = \hat{\mathrm{H}}_{\text{Паули}}\Psi_{\text{Паули}}(q,t).$$

$$\hat{\mathrm{H}}_{\text{Паули}} = \frac{1}{2m}\left(\mathrm{p} - \frac{e}{c}\mathrm{A}\right)^2 + e\varphi_0 - \frac{e\hbar}{2mc}(\vec{\sigma}\cdot\mathrm{B}).$$

$$\Psi(x,t) = \begin{pmatrix}\psi_1(x,t)\\ \psi_2(x,t)\end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix}\varphi_1(x)\\ \varphi_2(x)\end{pmatrix}\exp\left(-i\frac{E}{\mathrm{h}}t\right)$$

$$= \Phi(x)\exp\left(-i\frac{E}{\mathrm{h}}t\right) \qquad \boxed{\hat{H}\Phi = E\Phi}$$

Уравнение Паули

Спиновый резонанс

Спиновый резонанс

Спиновый резонанс

$$i\dot{u} = \omega_0 u + \omega' \exp\,(-i\omega t) v$$

$$i\dot{v} = -\omega_0 v + \omega' \exp\,(i\omega t) u$$

$$u = \frac{1}{\omega'}(i\dot{v} + \omega_0 v)\exp\,(-i\omega t)$$

$$i\dot{u} = \frac{i}{\omega'}[i\ddot{v} + \omega_0 \dot{v}]\exp(-i\omega t) - i\frac{\omega}{\omega'}[i\dot{v} + \omega_0 v]\exp\,(-i\omega t)$$

$$\ddot{v} - i\omega\dot{v} + (\omega_0^2 + \omega'^2 - \omega\omega_0)v = 0$$

Спиновый резонанс

Спиновый резонанс

$$\ddot{v} - i\omega\dot{v} + (\omega_0^2 + \omega'^2 - \omega\omega_0)v = 0$$

$$\lambda_{1,2} = \frac{\omega}{2} \pm \sqrt{\omega'^2 + (\omega_0 - \omega/2)^2} = \frac{\omega}{2} \pm \Omega$$

$$v = A\exp(i\lambda_1 t) + B\exp(i\lambda_2 t), \quad v(0) = 0, \quad B = -A$$

$$v(t) = A\exp\left(i\frac{\omega}{2}t\right)2i\sin(\Omega t)$$

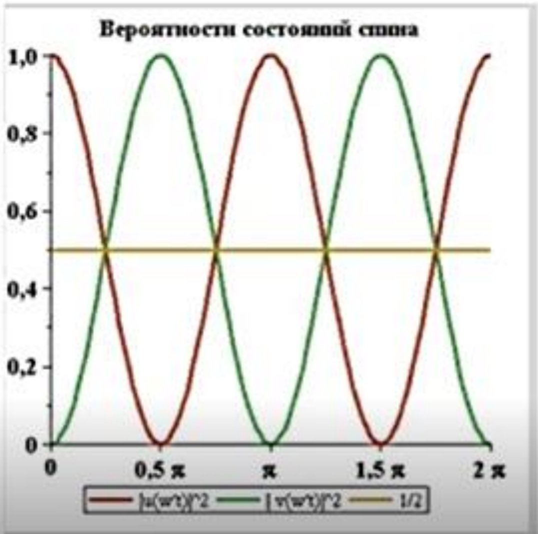
$$u(t) = -2\frac{A}{\omega'}\left[\Omega\cos(\Omega t) - i\left(\omega_0 - \frac{\omega}{2}\right)\sin(\Omega t)\right]\exp\left(-i\frac{\omega}{2}t\right)$$

$$u(0) = 1, \qquad A = -\frac{\omega'}{2\Omega}$$

Спиновый резонанс

Спиновый резонанс

Если частота переменного поля $\omega = \dfrac{eB_0}{mc}$



спин переворачивается

Спиновый резонанс
Если частота
переменного поля
спин переворачивается