③ "Координатное и импульсное представления. Вычисления средних. Операторы физич. величин, собственные функции и собственные знач."

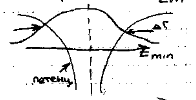
$\Psi(\vec{r},t)$ - волновая функция
$\Psi(\vec{p},t)$

Соотношение неопределенностей $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$ (будет доказано позже)

$\Delta x = \sqrt{\overline{(x-\bar{x})^2}}$ - среднее для Δp - аналогично

Среднее вычисляется по вероятности (по квадрату модуля волн. ф-и)

Энергия $E = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{|\vec{r}|}$ - частица в кулоновском поле
Δr - характерная ширина пакета.



Поскольку атом покоится и электрон никуда не улетает, можно заключить, что $\langle \vec{p} \rangle = 0$, в силу симметрии задачи $\langle \vec{r} \rangle = 0$

$\Rightarrow \quad \Delta p \sim \sqrt{\overline{p^2}} \quad \Delta r \sim \sqrt{\overline{r^2}}$

Характерные импульсы e^- в атоме ~ неопределенности (размеры тоже)
Можно принять, что $\Delta p \sim p \quad \Delta r \sim r$
С другой стороны $\Delta r \Delta p \gtrsim \hbar$

$r_{хар} p_{хар} \sim \hbar \qquad \left(E = \frac{\hbar^2}{2m p_{хар}^2} - \frac{e^2}{r_{хар}}\right)'_{r_{хар}} = 0$

$-\frac{\hbar^2}{m r_{хар}^3} + \frac{e^2}{r_{хар}^2} = 0 \qquad r_{хар} \sim \frac{\hbar^2}{me^2} \approx a_0 = 0{,}53 \cdot 10^{-8}$ см

$\bar{E} = -\overline{T_{кин}} = \frac{1}{2}\bar{U} = -\frac{e^2}{2r_{хар}} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} = -13{,}6$ эВ $= -1\,Ry$ (Ридберг)

min энергия
получили с помощью оценки, но он точный

Можно записать $\bar{E}$ так

$\bar{E} = -\frac{e^2}{2a_0} = -\frac{mc^2 e^4}{2\hbar^2 c^2} = -\frac{mc^2}{2}\alpha^2 \qquad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$ - постоянная тонкой структуры (название бессмысл.)

Характерная скорость e^- в атоме $V_{хар} = \frac{e^2}{\hbar}$

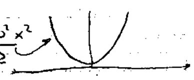
$\frac{V_{хар}}{c} \sim \frac{e^2}{\hbar c} \approx \alpha \Rightarrow$ движение e^- в атоме можно рассм. в нерел. прибл.

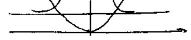
Де Бройль: На боровской орбите умещается целое число длин волн.

$2\pi r_{хар} = n\lambda, \quad \langle \lambda = \frac{\lambda}{2\pi} \rangle \quad \lambda = \frac{r_{хар}}{n} \quad p = \frac{\hbar}{\lambda} = \frac{\hbar n}{r_{хар}} \quad E = \frac{-me^4}{2\hbar^2 n^2}$

Теперь осциллятор:

Энергия $E = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$ $\qquad \Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$ (докажем потом)





"Вывод ур. Шредингера"

$\Psi_{\vec{p}}(\vec{r},t) = A e^{\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar} - \frac{iEt}{\hbar}} \equiv A e^{i\vec{k}\vec{r} - i\omega t} \qquad E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

простая волна де Бройля

Ур. Шредингера не может быть выведено.

$i\hbar \frac{\partial \Psi_p(\vec{r},t)}{\partial t} = E\Psi_p(\vec{r},t)$ - производная по времени

$-i\hbar\vec{\nabla}\Psi_p(\vec{r},t) = \vec{p}\Psi_p(\vec{r},t)$ - производная по координате

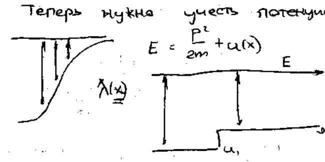
$-\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m}\Psi_p(r,t) = \frac{p^2}{2m}\Psi_p(\vec{r},t)$, т.к. $E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$\Rightarrow$ плоская волна де Бройля удовлетворяет уравнению

$i\hbar \frac{\partial \Psi(r,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m}\Psi(r,t)$ - свободное ур-е Шредингера

Любая суперпозиция волн де Бройля - решение уравнения, $\Rightarrow$ уравнение справедливо для любого волнового пакета волн де Бройля

Теперь нужно учесть потенциал:



$E = \frac{p^2}{2m} + u(x)$

$\Psi_p(x,t) = e^{\frac{ipx}{\hbar} - \frac{iEt}{\hbar}}$ - для такого потенциала удовл. ур-ю

$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi - u_1\Psi$

$E = \frac{p^2}{2m} + u_1$

Любой потенциал можно представить так:

отсюда получаем полное ур-е Шредингера

$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + u(r,t)\right)\Psi(r,t)$

Если u не зависит от t переменные r и t разделяются и $\Psi(r,t)$ представляется в виде $\Psi(r,t) = \Psi(r)A(t)$

ставим в уравнение:

$i\hbar\Psi(r)\frac{\partial A(t)}{\partial t} = A(t)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + u(r)\right]\Psi(r)$

Разделим обе части на $A(t)\Psi(r)$

тогда: $\frac{i\hbar}{A(t)}\frac{\partial A(t)}{\partial t} = E = \frac{1}{\Psi(r)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + u(\vec{r})\right]\Psi(r)$

Это эквивалентно 2-м уравнениям: $\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + u(\vec{r})\right]\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$

$i\hbar\frac{\partial A(t)}{\partial t} = EA(t) \rightarrow A(t) = A_0 e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$

!! Для потенциала, не зависящего от времени $\Psi(r,t)$ представляется в виде $\Psi(r,t) = \Psi(r)e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$

Т.к. уравнение по t линейно, то знание $\Psi(t,0)$ определяет дальнейшую эволюцию (принцип причинности).

Решение вида $\Psi(r,t) = \Psi(r)e^{-iEt/\hbar}$ - стационарно, т.к. $|\Psi(r,t)|^2 = |\Psi(r)|^2$ и соответствующее ур-е - стационарное.

!! Уравнения можно записать в операторном виде $\hat{Q}\Psi = q\Psi$, т.е. уравнение Шредингера - суть уравнение на отыскание собственных значений и собственных функций

Стационарное ур-е Шредингера пишется так:

$\hat{H}\Psi(r) = E\Psi(r)$

$\hat{H}$ - оператор Гамильтона; $\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}$

Т.о. для получения уравнения надо взять классическое уравнение

$E = \frac{p^2}{2m} + u(r) \qquad \vec{p} \rightarrow -i\hbar\vec{\nabla}$
$\qquad E \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$

Решив задачу $\hat{H}\Psi = E\Psi$ получим собственные функции и набор энергий - спектр Гамильтона (может быть дискр. или непрерывным)

Вычисление в кв. мех. наблюдаемых величин.

Пусть есть $\Psi(x,t)$
Как определить координату?

$\int \underbrace{|\Psi(x,t)|^2}_{\text{плотность вероятности}} dx = 1$

$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x\,|\Psi(x,t)|^2 dx$ - среднее значение координаты

представим Ψ так: $\Psi(x,t) = \int \varphi(p,t)e^{ipx/\hbar}dp\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ - x-представление

тогда: $\varphi(p,t) = \int \Psi(x,t)e^{-\frac{ipx}{\hbar}}\frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ - p-представление

$\int |\Psi(x,t)|^2 dx = \int |\varphi(p,t)|^2 dp = 1$ - равенство Парсеваля

Описание состояния через координаты (x,t) - описание в координатном представлении

через (p,t) - импульсное представление.

Средний импульс $\langle p \rangle = \int p\,|\varphi(p,t)|^2 dp$

$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x\,|\Psi(x,t)|^2 dx = \int \Psi^*(x,t)\,x\,\Psi(x,t)dx$

$\langle p \rangle = \int p\,|\varphi(p,t)|^2 dp = \int \varphi^*(p,t)\,p\,\varphi(p,t)dp =$

$= \int dp\left(\int \Psi^*(x',t)e^{ipx'/\hbar}dx'\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\right)p\left(\int \Psi(x,t)e^{-ipx/\hbar}dx\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\right) =$

$i\hbar\frac{d}{dx}e^{i\frac{px}{\hbar}}$

$= \int dp\int \Psi^*(x',t)e^{\frac{ipx'}{\hbar}}\frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\Psi(x,t)\right)e^{-ipx/\hbar}dx\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \ominus$

$\langle \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{ip(x'-x)}{\hbar}}\frac{dp}{2\pi\hbar} = \delta(x-x') \rangle$

$\ominus \int \Psi^*(x,t)\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)\Psi(x,t)dx$ - имеем среднее значение импульса в координатном представлении (т.е. выраженное через $\Psi(x,t)$)

$\langle p \rangle = \int \Psi^*(x,t)\hat{p}_x\Psi(x,t)dx$

$\hat{p}_x = i\hbar\frac{d}{dx}; \quad \hat{\vec{p}} = i\hbar\vec{\nabla}$

В квантах всем физ величинам так или иначе сопоставляется оператор, есть общая формула:

$\langle \hat{Q} \rangle = \int \Psi^*(\xi,t)\hat{Q}\Psi(\xi,t)d\xi$

некая физ. величина.

Уравнение на собственные значения

$-i\hbar\nabla\Psi(r,t) = \vec{p}\Psi(r,t)$

Сопоставим всем физ. величинам операторы

$\hat{x} = x$
$\hat{p} = p$ $\quad$ - оператор умножения на x и p.

	Координатное предст.	Импульсное предст.
Коорд.	$\hat{x} = x$	$\hat{x} = i\hbar\vec{\nabla}_p$
Имп.	$\vec{p} = i\hbar\vec{\nabla}$	$\hat{p} = p$

Пример собственных функций:

$\hat{x}\Psi_{x_0}(x) = x\Psi_{x_0}(x) = x_0\Psi(x)$

если $\Psi_{x_0}(x)$ - собственная функция

$(x - x_0)\Psi_{x_0}(x) = 0$

В этом случае $\Psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$

и однозначность в.ф. Собственная функция и собственные значения. Квантование энергии. Свойства в.ф. финитного движения. Четные и нечетные решения.
Осцилляционная теорема.

② Примеры.

$$H = \frac{p^2}{2m} + U(\bar r) \Rightarrow \hat H = -\frac{\hbar^2}{2m}\bar\nabla^2 + U(\bar r)$$ – оператор

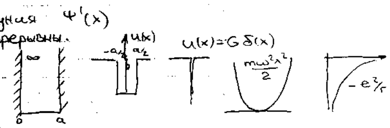
$$\hat H \Psi(r) = E\Psi(\bar r)$$

$$\Psi(\bar r, t) = \Psi(r)e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

1) $\Psi(\bar r)$, $\Psi(x)$ – одномерный случай
Волновая ф-я во всем пространстве должна быть конечной, непрерывность, однозначность.

Одномерное ур-е Шр.: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x) \Rightarrow$ непрерывность.

2) Еще одно свойство. Производная $\Psi'(x)$
как правило, производные непрерывны.
Стандартные виды потенциалов



$U(x) = G\delta(x)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$$

$$\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon}\Psi''(x)dx = \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon}\frac{2m}{\hbar^2}(U(x)-E)\Psi(x)dx$$ – интегрируем ур-е Шр.

$$\Psi'(a+\varepsilon) - \Psi'(a-\varepsilon) = \frac{2m}{\hbar^2}\Psi(a)\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon}U(x)dx$$ – непрерывность.

Но! Бывают исключения. Например: $U(x) = -G\delta(x)$

$$\Psi'(a+\varepsilon) - \Psi'(a-\varepsilon) = \frac{-2mG}{\hbar^2}\Psi(a)$$ – т.е. производная терпит скачок.

3) При решении уравнения $\Psi(x)$ можно всегда выбрать действ. Если спектр ур-я невырожденный то вф. действительны.

Опр: Если одному значению энергии соответствует одно значение энергии, то спектр невырожден, если несколько – то спектр вырожден.

4) В одномерном случае при дискретном спектре, спектр невырожден.

$$\frac{\Psi_1''}{\Psi_1} = \frac{2m}{\hbar^2}(U-E)$$, пусть есть 2 такие $\Psi(x)$;

$$\frac{\Psi_2''}{\Psi_2} = \frac{2m}{\hbar^2}(U-E) \quad \frac{\Psi_1''}{\Psi_1} = \frac{\Psi_2''}{\Psi_2} \quad \Psi_1''\Psi_2 - \Psi_2''\Psi_1 = 0 = \frac{d}{dx}(\Psi_1'\Psi_2 - \Psi_2'\Psi_1)$$

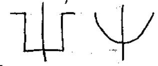
$\Rightarrow$ при $|x| \to \infty$ $\quad \Psi_1'\Psi_2 - \Psi_2'\Psi_1 = const \equiv 0$

Интегрируем последнее уравнение:

$$\frac{\Psi_1'}{\Psi_1} = \frac{\Psi_2'}{\Psi_2} \quad \ln\Psi_1 = \ln\Psi_2 + C \Rightarrow \Psi_1 = \tilde C\Psi_2$$, но т.к. они нормированы $\Psi_1 = \Psi_2$.

т.о. спектр задачи в одн. случае при дискр. энергиях невырожден.

5)
Рассмотрим симметричные потенциалы

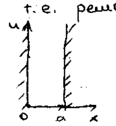


$U(x) = U(-x) \Rightarrow \hat H(x) = \hat H(-x)$

$$\begin{aligned}\hat H(x)\Psi_n(x) &= E_n\Psi_n(x)\\ \hat H(-x)\Psi_n(-x) &= E_n\Psi_n(-x)\\ \hat H(x)\Psi_n(-x) &= E_n\Psi_n(-x)\end{aligned} \Rightarrow \begin{aligned}&\Psi_n(-x) = c\Psi_n(x)\\ &\Psi_n(x) = c\Psi_n(-x) = c^2\Psi_n(x) \quad c = \pm 1\end{aligned}$$

т.о. $\left[\begin{aligned}\Psi_n(x) &= \Psi_n(-x)\\ \Psi_n(x) &= -\Psi_n(-x)\end{aligned}\right.$

т.е. решения либо четны, либо нечетны



$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi = E\Psi$$ – ур-е Шр.

$$\boxed{\Psi'' = -k^2\Psi} \quad k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}$$

$\Psi = A\sin(kx + \alpha)$; $\Psi(0) = \Psi(a) = 0$, $\quad \alpha = 0$ (из первого г.у.) $ka = n\pi \quad n = 1, 2, 3\ldots$

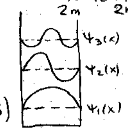
$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2ma^2} \quad \Psi_n = A\sin(knx)$$

$$|A|^2\int_0^a \sin^2 knx\,dx = 1 = |A|^2\int_0^a \frac{1-\cos 2knx}{2}dx = |A|^2\frac{a}{2}$$

$$\Rightarrow \sqrt{\frac{2}{a}}\sin knx = \Psi_n$$

$E_1 \neq 0$ оценка из соотношения неопр.

$$\frac{p^2}{2m} \sim \frac{\delta p^2}{2m} \sim \frac{\hbar^2}{\delta x^2}\frac{1}{2m} \sim \frac{\hbar^2}{2a^2m}$$ – т.е. ошиблись на π^2.



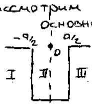
6) Волновая функция основного состояния не имеет нулей $\Rightarrow$ невырождена.

7) $\int\Psi_m^*(x)\Psi_n(x)dx = \delta_{mn}$ – т.е. волновые функции ортогональны между собой (отв. разным энергиям)

8) Осцилляционная теорема (только одномерный случай)

Если взять Ψ_n то она внутри области имеет $n-1$ нуль

Рассмотрим конечную яму. Докажем, что в одномерной яме всегда $\exists$ основной уровень энергии.



$$\Psi''_{I,III} = \varkappa^2\Psi \quad \varkappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(-E)} \quad E < 0$$

$$\Psi''_{II} = -k^2\Psi \quad k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 + E)}$$

Заметим, что $k^2 + \varkappa^2 = \frac{2mU_0}{\hbar^2}$

$\Psi_I = c_1 e^{\varkappa x} + \cancel{ce^{-\varkappa x}}$ – затухание на бесконечности

$\Psi_{II} = c\cos kx$, $\tilde c\sin kx$

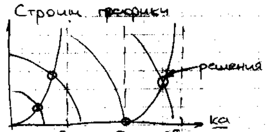
$\Psi_{III} = \pm c_1 e^{-\varkappa x}$ – сшивка на границе согласно знаку.

Сшиваем: граница I ↔ II $\quad c_1 e^{-\varkappa a/2} = c\cos k\,a/2$
производные: $c_1 e^{-\varkappa a/2}\cdot\varkappa = +ck\sin k\,a/2$

$$\left.\frac{\Psi_I'}{\Psi_I}\right|_{x=-\frac{a}{2}} = \left.\frac{\Psi_{II}'}{\Psi_{II}}\right|_{x=-a/2}$$ – сшивка логарифмических производных

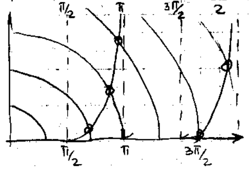
$$\begin{cases}k\,\mathrm{tg}\frac{ka}{2} = \varkappa & \text{– для симметричных решений}\\ -k\,\mathrm{ctg}\frac{ka}{2} = \varkappa & \text{– для антисимметричных решений}\end{cases}$$

Строим графики



$$\frac{ka}{2}\mathrm{tg}\frac{ka}{2} = \frac{\varkappa a}{2}$$ симметричные решения есть всегда (для всех U_0)

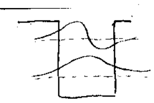
$$k^2 + \varkappa^2 = \frac{2mU_0}{\hbar^2}$$



антисимметричные решения (есть не всегда)

$$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{2mU_0a^2}{\hbar^2}} = \frac{ka}{2} \cdot \mathrm{tg}\frac{ka}{2} = \frac{\varkappa}{k} = \frac{\sqrt{-E}}{\sqrt{U_0+E}} \ll 1$$

$$E_{осн} = \frac{-mU_0^2a^2}{2\hbar^2} = -U_0 \cdot \frac{mU_0a^2}{2\hbar^2}$$



Тяжелый случай: мелкая яма
$$\varkappa > 0 \quad \mathrm{tg}\frac{ka}{2} = \frac{\varkappa}{k}, \frac{\sqrt{-E}}{\sqrt{U_0+E}} \ll 1 \quad \dot E \ll U_0$$

$$\mathrm{tg}\frac{ka}{2} \approx \frac{ka}{2} \approx \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}U_0a^2}$$

Критерий мелкости ямы $\frac{mU_0a^2}{\hbar^2} \ll 1$

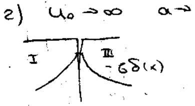
$$E_{осн} = \frac{-mU_0^2a^2}{2\hbar^2} = -U_0\frac{mU_0a^2}{2\hbar^2} \Rightarrow$$ в мелкой яме уровень где-то у поверхности

В трехмерной яме не обязательно есть связанные состояния.

$U_0 \cdot a = G$

1) Если a – мало $\Rightarrow$ яма уже мелкая.

2) $U_0 \to \infty \quad a \to 0 \quad \int_{-\infty}^{+\infty}U(x)dx = G \Rightarrow \delta$-функция
яма имеет только 1 уровень



$-G\delta(x)$

$$\begin{aligned}\Psi_1 &= Ae^{-\varkappa|x|}\\ \Psi_1 &= Ae^{-\varkappa|x|}\end{aligned}\ \Big|\ \text{из условий сшивки}\ \Big| \Rightarrow E = -\frac{mG^2}{2\hbar^2} = -\frac{\hbar^2\varkappa^2}{2m}$$

В узкой яме частица почти полностью находится в классически недоступной области.
Нормировка $A = \sqrt{\varkappa}$
Скачок производной: $\Psi_2' - \Psi_1' = -\frac{2mG}{\hbar^2}\Psi(x_0)$

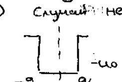
Лекция 4

① Мелкая яма (продолжение)

② Эрмитовы операторы. Вещественность с.з., взаимоортогональность и полнота системы с.ф. (вырожденный случай)

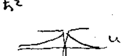
③ Обозначения Дирака ЛЛ. III гл. I, II ©§45 задача 1

④ Случай непрерывного спектра

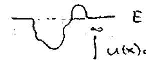


$$\frac{mU_0a^2}{\hbar^2} \ll 1 \qquad E = -U_0\frac{mU_0a^2}{2\hbar^2} = -\frac{mU_0a^2}{2\hbar^2} \qquad U_0a = G$$

$k \approx \sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2}} \quad \varkappa a \ll 1 \quad a \ll 1/\varkappa$



$U = -G(x)$
$\Psi = \sqrt{\varkappa}e^{-\varkappa|x|}$
$\varkappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(-E)}$



$$E \approx -\frac{m}{2\hbar^2}\left|\int U(x)dx\right|^2$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}U(x)dx < 0$$

Момент. Сопоставляем оператор

$$\bar M = [\bar r \times \bar p] \to \hat{\bar M} = [\bar r\,x\,-i\hbar\bar\nabla] \qquad M_z = \hbar\left(-i\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\right) = \hbar\hat l_z$$

Волновая функция однозначна: $\psi_\lambda(\varphi+2\pi)=\psi_\lambda(\varphi)$ $\lambda=m=0,\pm1,\pm2\ldots$

$$\int|\psi_\lambda(\varphi)|^2d\varphi=1$$ – нормируем.

$$\psi_m(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}$$

$\Rightarrow$ проекция момента количества движения тоже квантуется

Эрмитовы операторы

Свойство 1. Для линейных операторов $\hat Q(c_1\psi_1+c_2\psi_2)=c_1(\hat Q\psi_1)+c_2(\hat Q\psi_2)$

Примеры линейных операторов: $\hat x$, $\hat p_x=-i\hbar\frac{d}{dx}$, $\hat H=-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}+U(\vec r)$, $\hat{\vec\mu}$

Это свойство – следствие принципа суперпозиции.

Свойство 2. Для наглядности берем гамильтониан (можно любой другой)

$\hat H\psi_n=E_n\psi_n$ – задача на собственные значения.

Пусть спектр дискретный значит $E_n^*=E_n$

$$\int\psi^*(x)\hat H\psi(x)dx=\langle E\rangle=\langle E\rangle^*$$

$$\int\psi_1^*(x)\hat H\psi_2(x)dx=\int\left(\hat H^+\psi_1(x)\right)^*\psi_2(x)dx$$, тогда $\hat H^+$ – эрмитово-сопряженный оператор.

Оператор наз-ся эрмитовым, если $\int\psi_1^*(x)\hat H\psi_2(x)dx=\int(\hat H\psi_1(x))^*\psi_2(x)dx$

$u_iA_{ij}v_j=(A^{*T}_{ji}u_i)^*v_i$ Если $A^{*T}_{ji}=A_{ji}$ – то она эрмитова $\boxed{\hat H^+=\hat H}$

Следствия:

1. $\langle E\rangle=\int\psi^*(x)\hat H\psi(x)dx=\int(\hat H\psi(x))^*\psi(x)dx=\left(\int\psi^*(x)\hat H\psi(x)dx\right)^*$

Средние значения эрмитовых операторов действительны

2. $\int\psi_n^*(x)\hat H\psi_n(x)dx=E_n\int\psi_n^*(x)\psi_n(x)dx=E_n^*\int\psi_n^*\hat H\psi_n(x)dx$

Собственные значения э.о. тоже действительны

3. $\int\psi_m^*(x)\hat H\psi_n(x)dx=E_n\int\psi_m^*(x)\psi_n(x)dx=E_m\int\psi_m^*(x)\psi_n(x)dx$

$E_m\neq E_n$ $\boxed{\int\psi_m^*(x)\psi_n(x)dx=0\quad m\neq n}$

Волновые ф-и, отвечающие разным собственным значениям, ортогональны

4. E_n, ψ_{n_1}, ψ_{n_2}, $\int\psi_{n_1}^*(x)\psi_{n_2}(x)dx=A$

$\psi_{n(1,2)}=\psi_{n_2}-A\psi_{n_1}/N_1$ – ортогональна ψ_{n_1}

Собственные зн. эрмитовых оп. действительны, их с.ф. ортонормированы.

$$\sum_k\underbrace{\int dx\,\psi_m^*(x)\hat A\psi_k(x)}_{A_{mk}}\cdot\underbrace{\int\psi_k^*(x')\hat B\psi_n(x')dx}_{B_{kn}}=\sum_k A_{mk}B_{kn}$$

т.е. все свелось к матричному произведению, используя св-во полноты

Обозначения Дирака

Матричный элемент

$$\int\psi_m^*(x)\hat A\psi_n(x)dx=\langle m|\hat A|n\rangle$$, $\langle bra|c|ket\rangle$

В этой записи содержится указание на рассматриваемое состояние (m и n)

1) $\langle m|A|n\rangle=\langle n|A|m\rangle^*$ – эрмитовость

2) $\langle m|n\rangle=\delta_{mn}$ – ортогональность

3) $\sum_n|n\rangle\langle n|=\hat I$ – полнота

Как выглядит волновая ф-а на этом языке.

$|\psi\rangle$ – рассматриваем как вектор в некотором пр-ве

$|x\rangle$ – базис в этом пространстве

Проэктируем $\langle x|\psi\rangle=\psi(x)$ – проекция на базис.

$\langle x|n\rangle=\psi_n(x)$ – с энергией n-го уровня (n – квантовое число)

т.е. n – индекс состояния, а x – индекс представления.

Случай непрерывного спектра

$\hat f\to f$ $\psi(x)=\int a_f\psi_f(x)df$ – не в виде дискретного ряда, а в виде интеграла, т.к. f пробегает непр. ряд значений

Смысл a немного другой

Лекция 5.

1. Нормировка в.ф. непрерывного спектра
2. Соотношения между операторами. Коммутаторы.
3. Линейный осциллятор. Уровни энергии и волновые функции. Операторы рождения и уничтожения. Л.Л. III §§ 2, 5, 10, 15, 23

$\psi(x)=\sum a_n\psi_n(x)$ (1) $a_n=\int\psi_n^*(x)\psi(x)dx$ (2) $\int|\psi(x)|^2dx=\sum|a_n|^2=1$ (3)

Это базовые положения.

Вывели: (2)→(1)

$$\sum_n\psi_n(x)\psi_n^*(x')=\delta(x-x')$$

(1)→(2)

$$\int\psi_m^*(x)\psi_n(x)dx=\delta_{nm}$$

$$\int|\psi_n(x)|^2dx=1$$

этих энергий

$$\psi(x)=\sum a_n\psi_n(x)$$ $a_\psi(x)$ $E_n(x)$

Измеряя много раз можно получить целую выборку (?), т.е. любое состояние можно разложить по собственным функциям

Рассмотрим $\int|\psi(x)|^2dx=\int|\sum_n a_n\psi_n(x)|^2dx=\sum_n|a_n|^2=1$

Найдем эти коэфф. $\int\psi_m^*(x)\psi(x)dx=\sum_n a_n\int\psi_m^*(x)\psi_n(x)dx=\sum_n a_n\delta_{nm}=a_m$

Среднее значение энергии, т.к. $\hat H\psi_n(x)=E_n\psi_n(x)$

$\langle E\rangle=\int\psi^*(x)\hat H\psi(x)dx=\sum_n E_n|a_n|^2$ – классическое определение среднего значения

$|a_n|^2$ – показывает вероятность обнаружить n-ное значение. С другой стороны

$\psi(x)=\sum_n a_n\psi_n(x)$, т.е. a_n – амплитуда, с которой $\psi_n(x)$ входит в $\psi(x)$

Представим условие полноты математически.

$$\psi(x)=\sum_n a_n\psi_n(x)=\sum_n\psi_n(x)\int\psi_n^*(x')\psi(x')dx'=\int\underbrace{\left(\sum_n\psi_n(x)\psi_n^*(x')\right)}_{\text{ядро.}}\psi(x')dx'$$

Ядро должно быть устроено так, чтобы при интегрировании появлялась также самая волновая функция, поскольку ф-и произвольны должно быть тождество.

Для этого ядро $=\delta(x-x')$

$\boxed{\sum_n\psi_n(x)\psi_n^*(x')=\delta(x-x')}$ – условие полноты

Матричные элементы

$\langle Q\rangle=\int\psi^*(x)\hat Q\psi(x)dx$ Разложим по полной системе функций некоторого другого оператора

$$\langle Q\rangle=\int\left(\sum_m a_m^*\psi_m^*(x)\right)\hat Q\left(\sum_n a_n\psi_n(x)\right)dx=\sum_{mn}a_m^*a_n\int\psi_m^*(x)\hat Q\psi_n(x)dx=\sum_{mn}a_m^*a_n\underset{\text{эл-т матрицы}}{Q_{mn}}$$

т.е. можно сопоставить матрицу Q_{mn}

Тогда Q в базисе собственных функций диагональна

Тогда $\sum_{mn}a_m^*a_nQ_{mn}\Rightarrow\sum_n q_n|a_n|^2$; $\int\psi_n'(x)\underbrace{\hat Q\psi_2(x)}_{\varphi(x)}dx$

Все эти интегралы имеют однотипный смысл амплитуды вероятности найти одно состояние $\varphi(x)$ в другом $\psi_1(x)$, это как скалярное произведение для векторов.

Предположим нас интересует величина

$$\int\psi_m^*(x)\hat A\hat B\psi_n(x)dx=\int dx\int dx'\,\psi_m^*(x)\hat A(x)\,\delta(x-x')\hat B(x')\psi_n(x')=$$

Непрерывный спектр:

$\psi(x)=\int a_f\psi_f(x)df$ (I)

$a_f=\int\psi_f^*(x)\psi(x)dx$ (II) (?)

$\int|\psi(x)|^2dx=\int|a_f|^2df=1$ (III)

Делаем аналогично. Ставим II в I

$$\psi(x)=\int\psi(x')\left(\int\psi_f(x)\psi_f^*(x')df\right)dx'$$

Условие полноты для дискретного спектра: $\int\psi_f(x)\psi_f^*(x')df=\delta(x-x')$

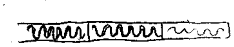
Переходим к нормировке в.ф. непрерывного спектра.

$$a_f=\int a_{f'}\underbrace{\left(\int\psi_f^*(x)\psi_{f'}(x)dx\right)}_{\delta(f-f')}df$$

$\int\psi_f^*(x)\psi_{f'}(x)dx=\delta(f-f')\longrightarrow\int|\psi_f(x)|^2dx=\infty$ – пытаемся объяснить

$\psi(x)$ на бесконечности отлично от 0, т.е. движение инфинитно, например рассеяние частиц

$-i\hbar\frac{d}{dx}\psi_p(x)=p\psi_p(x)$ $\psi_p(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipx/\hbar}$ $\int\psi_p^*(x)\psi_{p'}(x)dx=\delta(p-p')$

$|\psi_p(x)\sqrt{2\pi\hbar}|^2=1$ – одна частица в единице объема 

т.е. получается пучок частиц.

$\hat p\psi_{p_0}(p)=p\psi_{p_0}(p)=p_0\psi_{p_0}(p)$ $(p-p_0)\psi_{p_0}(p)=0$

$\int\psi_{p_0'}^*(p)\psi_{p_0}(p)dp=\delta(p_0-p_0')$ – т.е. удовлетворяет усл. нормировки

$\psi_{x_0}(x)=\delta(\quad)$

Пункт плана 2, поверхностно.

Есть 2 оператора, отвечающих физ. величинам. $\hat A$, $\hat B$

$\hat A\hat B\psi\overset{(?)}{\longleftrightarrow}\hat B\hat A\psi$

Рассмотрим такую конструкцию $(\hat A\hat B-\hat B\hat A)\psi\equiv[\hat A\hat B]\psi\to0\to[\hat A,\hat B]=\hat 0$

Говорят, что $\hat A$ и $\hat B$ перестановочны друг с другом, т.е. коммутативно, если

$[\hat A,\hat B]=\hat 0$ – для $\forall\psi(x)$

$x\hat p_x\psi(x)=-i\hbar x\frac{d}{dx}\psi(x)$

$\hat p_x x\psi(x)=-i\hbar\left(\psi(x)+x\frac{d}{dx}\psi(x)\right)$

Т.о. $[\hat p_x x]=-i\hbar\psi(x)$ – для $\forall\psi(x)$

$[\hat p_x x]=-i\hbar$ – т.е. $\hat p_x$ и x не коммутируют.

Физ. смысл: Невозможно построить такое состояние $\psi(x)$, что $\Delta p\Delta x<\frac{\hbar}{2}$

Предполагая $[\hat p_x,x]=-i\hbar$ можно прийти к гипотезе De-Бройля и наоборот

2) Простей задачи $A=A$ $B=B$ то в каком случае (AB)

3) $(AB)_{классич} = (BA)_{классич}$ Какой оператор сопоставить величине $\hat{B}\hat{A}$, $\hat{A}\hat{B}$

4) Докажем такое важное равенство: $\langle L^+L\rangle = \int \psi^*(x) L^+ L \psi(x) dx \geq 0$

$$\int (L\psi(x))^* (L\psi(x)) dx = \int |L\psi(x)|^2 dx \geq 0$$

Переходим к пункту 3. Гармонический осциллятор. Линейный, одномерный.

Гамильтониан $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$ Ставим задачу на собств. значения

$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$, распишем это подробно

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right)\psi(x) = E\psi(x)$$

Удобно ввести безразмерные переменные $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ $\xi = \frac{x}{x_0}$ – безразмерна

$\frac{2E}{\hbar\omega} = \lambda$. В итоге: $\psi'' + (\lambda + \xi^2)\psi = 0$ – имеет особые точки на бесконечности

$$\psi(\xi)_{|\xi|\to\infty} \quad \psi''_\infty = \xi^2 \psi_\infty \quad \psi_\infty \sim e^{\pm \xi^2/2}$$

$\psi_\infty = c_1 e^{-\xi^2/2} + c_2 e^{+\xi^2/2}$, растущее на ∞ решение нам не подходит, поэтому примем $c_2 \equiv 0$.

Асимптотику выяснили. Решение ищем в виде $\psi(\xi) = V(\xi) e^{-\xi^2/2}$

Чтобы не появлялось растущего решения положим $V(\xi)$ полиномом

$V(\xi) = \sum_k a_k \xi^k$ $\quad e^{-\xi^2/2}[V''(\xi) - 2\xi V'(\xi) + (\lambda - 1)V(\xi)] = 0$ – после несложных операц.

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k [k(k-1)\xi^{k-2} - (2k+1-\lambda)\xi^k] = 0$$

При одинаковых степенях ξ имеем $\sum_{k=0}^{\infty} \xi^k [(k+2)(k+1)a_{k+2} - (2k+1-\lambda)a_k] = 0$

Отсюда рекурентное соотношение $a_{k+2} = \frac{2k+1-\lambda}{(k+2)(k+1)} a_k$

Получили фактически 2 ряда $k = 0, 2, 4 \ldots$
$k = 1, 3, 5 \ldots$, отвечающие четным и нечетным решениям

$\underset{фикс.}{\xi}$ λ $\left.\frac{\xi^{k+2} a_{k+2}}{\xi^k a_k}\right|_{k\to\infty} = \xi^2 \left.\frac{2}{k}\right|_{k\to\infty} \to 0$ – ряд сходится

Однако, если $2k+1 > \lambda$ то ряды перестают быть знакопеременными, и $\Rightarrow$ при $\xi \to \infty$ ряд будет расходится.

Возьмем четный ряд.

$\underset{k-четн.}{V(\xi) \to e^{\xi^2}}$ $\quad e^{\xi^2} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\xi^2)^k}{k!} = \sum_{m=0,1,2\ldots} \frac{\xi^m}{(m/2)!}$

$\xi \to \infty$ получим растущее решение. Единственный способ этого избежать –

Ставим задачу на собственные значения для оператора $\hat{N}$ числа частиц.

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{N} + \tfrac{1}{2}\right)$$

$\hat{N}|n\rangle = \lambda_n |n\rangle$ – пусть существует хотя бы одно решение λ_n

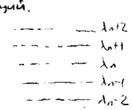
Рассмотрим:

$$\hat{N}(\hat{a}^+|n\rangle) = \hat{a}^+ \underline{\hat{a}\hat{a}^+}|n\rangle = \hat{a}^+(\underbrace{\hat{a}^+\hat{a}}_{\hat{N}} + 1)|n\rangle = \hat{a}^+(\lambda_n + 1)|n\rangle =$$
$$= (\lambda_n + 1)\hat{a}^+|n\rangle$$

т.е. a^+ – повышает λ_n на 1, т.е. повышает число частиц и уровень энерг.

$\hat{N}(\hat{a}|n\rangle) = (\lambda_n - 1)\hat{a}|n\rangle$ – понижаем, т.е. a – понижающий.

$\langle \hat{N} = \hat{a}^+ a \rangle \geq 0$ – это доказывали, $\Rightarrow$ спектр неотрицателен



т.е. должно $\exists$ такое состояние (обозначим $|0\rangle$), что

$$\hat{a}|0\rangle = 0$$

$$E_n = \hbar\omega(n + \tfrac{1}{2})$$

Если возьмем сначала другое λ_n, то все решения наложатся на полученную серию решений.

Лекция 6. 07.10.02

① Осциллятор (продолжение)
② Временное уравнение Шредингера. Стационарные решения. Задачи с нач. условиями.
③ Одномерное рассеяние
Подбарьерное прохождение и надбарьерное отражение.
Л.Л. §§ 8, 9, 10, 19, 23, 41. Зелевинский Т.I. Лекц. 5, 14

В операторном формализме нам осталось получить волновые функции

$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2})$ $\quad \hat{H}|n\rangle = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})|n\rangle$;

$\hat{a}^+|n\rangle = c_n|n+1\rangle$ $\quad \hat{a}|n\rangle = \tilde{c}_n|n-1\rangle$ $\quad [aa^+] = 1 = \hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a}$

$\langle n|\hat{a}\hat{a}^+|n\rangle = |c_n|^2 = \langle n|1 + a^+a|n\rangle = \langle n|n\rangle(1+n) = (1+n)$ $\quad c_n = \sqrt{1+n}$, $\tilde{c}_n = \sqrt{n}$

$|n\rangle = \frac{\hat{a}^{+n}}{\sqrt{n!}}|0\rangle$ $\quad \hat{a}|0\rangle = 0|0\rangle = 0$ – все состояния в операторном формализме

$$\left[\frac{x}{x_0} + i\frac{x_0}{\hbar}\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)\right]\psi_0(x) = 0$$

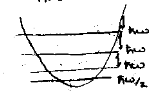
$\frac{d\psi_0(x)}{dx} + \frac{x}{x_0^2}\psi_0(x) = 0$ $\quad \psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}$ – основное отнормированное состояние.

$\langle n+1|\hat{a}^+|n\rangle = (\hat{a}^+)_{mn}$ – только элементы над диагональю
$\langle n-1|\hat{a}|n\rangle = (\hat{a})_{mn}$ – только элементы под диагональю

При нечетном $a_1 = 0$.

~~нечетн~~ (?)

$\frac{2E}{\hbar\omega} = \lambda$ $\quad E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ – уровни энергии осциллятора, дискретны.



$\psi_n(\xi) = \hat{C}_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}$, H_n – полиномы. $\hat{C}_n$ – нормировочная констата

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

полиномы Эрмита. Четные и нечетные чередуются.

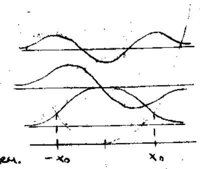
$\psi_n(\xi) = C_n H_n\left(\frac{x}{x_0}\right) e^{-x^2/2x_0^2}\frac{1}{\sqrt{x_0}}$; $C_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}}$

Вот мы и описали осциллятор.

Теперь св-ва.

$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$ – Гаусс

$\psi_1(x) \sim x\psi_0(x)$



$\int \psi_n^*(x)\psi_{n'}(x)dx = 0$, $n' > n$ – покажем.

(Полиномы Эрмита можно представить так: $H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}e^{-\xi^2}$

$\int H_n(\xi)\frac{d^{n_1}}{d\xi^{n_1}}e^{-\xi^2}d\xi = 0$ – берем по частям n_1 раз. Внеинтегральная часть каждый раз зануляется, остается $\int H_n^{(n)} e^{-\xi^2}d\xi$, но $n' > n$ и интеграл 0.

$\frac{\hbar\omega}{2} = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$ $\quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ – это точка поворота, для основного уровня.

Поэтому, чтобы найти вероятность нахождения частицы в классически запрещенной зоне $2\int_{x_0}^{\infty}|\psi_0(x)|^2 dx = 2\int_{x_0}^{\infty}\left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/2} e^{-m\omega x^2/\hbar}dx = 2\int_1^{\infty} e^{-\xi^2}d\xi \approx 0{,}1585$

Метод решения задачи об осцилляторе через обозначения Дирака

Введем операторы $\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{x_0} + i\frac{x_0}{\hbar}\hat{p}\right)$

$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{x_0} - i\frac{x_0}{\hbar}\hat{p}\right)$ – эрмитово-сопряженный

осцилят.
метод I
метод D

$x = \frac{x_0(\hat{a}^+ + \hat{a})}{\sqrt{2}}$

$\hat{p} = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}x_0}(\hat{a}^+ - \hat{a})$ $\quad H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$

$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^+)$

Коммутационное соотношение $[\hat{p}x] = -i\hbar \to \hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a} = [\hat{a}\hat{a}^+] = 1$

$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2})$ – переписали так.

$(\hat{x})_{mn} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\delta_{mn+1}\sqrt{n+1} + \delta_{mn-1}\sqrt{n}\right)$, т.к. $x = \frac{x_0}{\sqrt{2}}(\hat{a}^+ + \hat{a})$

$(\hat{p})_{mn} = i\sqrt{\frac{\hbar\omega m}{2}}\left(\delta_{mn+1}\sqrt{n+1} - \delta_{mn-1}\sqrt{n}\right)$ – матрицы эрмитовы, это легко проверить

Посчитаем дисперсию

$\overline{(x - \bar{x})^2} = \Delta x^2$; $\bar{x} = 0$

$$\overline{x^2} = \frac{\hbar}{2m\omega}\langle n|\hat{a}^+\hat{a}^+ + \hat{a}\hat{a} + \hat{a}^+\hat{a} + \underset{1+\hat{a}^+\hat{a}}{\hat{a}\hat{a}^+}|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1)$$

$\overline{p^2} = \frac{\hbar m\omega}{2}(2n+1)$.

$$\sqrt{\Delta x^2 \Delta p^2} = \frac{\hbar}{2}(2n+1)$$

При $n = 0$ $\sqrt{\Delta x^2 \Delta p^2} = \frac{\hbar}{2}$ – самое близкое к классике состояние

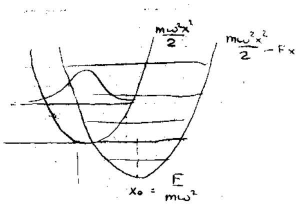
$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle$

$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$

$\alpha = Ae^{i\varphi}$ – собств. значения

$|\alpha t\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle e^{-i\omega n t}$

$\langle \alpha, t|\hat{x}|\alpha, t\rangle \sim A\cos(\omega t - \varphi)$



$i\hbar\frac{\partial\psi(r,t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(r,t) = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\bar{r})\right)\psi(r,t)$ рассматриваем случай, когда U не зависит от t.

$\psi(r,t) = \psi(r)e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$ $\quad \hat{H}\psi_n(r) = E_n\psi_n(r)$

$$\boxed{\psi(r,t) = \sum_n a_n\psi_n(r)e^{-iE_n t/\hbar}}$$

1) уравнение Ш. линейно, т.е. if $\psi_1(x,t)$, $\psi_2(x,t)$ – решения, то $c_1\psi_1(x,t) + c_2\psi_2(x,t)$ – тоже решение

2) $i\frac{\partial}{\partial t}$ $\quad \psi(r, t_0)$

$\psi_n(x)e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}$

$a_n = \int\psi_n^*(r)\psi(r,0)d^3r$

$$\psi(\bar{r},t) = \int\underbrace{\sum_n\psi_n(r)\psi_n^*(\bar{r}')e^{-iE_n t/\hbar}}_{G(\bar{r},\bar{r}',t)}\psi(r',0)d^3r'$$

$G(\bar{r},\bar{r}',t)$ – функция Грина, или ф-я распространения

$$\begin{cases} G(\bar{r},\bar{r}',t=0) = \delta(\bar{r}-\bar{r}') = \sum\psi_n(r)\psi_n^*(r') \\ i\hbar\frac{\partial G(r,r',t)}{\partial t} = \hat{H}(r)G(r,r',t) \end{cases}$$

Мы уже говорили о принципе причинности

① $|\Psi_n(x,t)|^2 = |\psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}|$

② $\langle n t|\hat{Q}|n t\rangle$ – не зависит от t

$\langle n,t|\hat{Q}|n,t\rangle \equiv \langle n|\hat{Q}|n\rangle$

③ $\int|\Psi(x,t)|^2 dx = 1$ – не зависит от t
не зависит от t

$\Psi(x,t)$ разлагается в сумму, подставим оба ряда, перекрестные члены уйдут, получится Σ модулей в квадрате.

Другой вывод $\frac{\partial|\Psi(x,t)|^2}{\partial t} = \Psi^*(x,t)\frac{\partial}{\partial t}(\Psi(x,t)) + \frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial t}\Psi(x,t) \ominus$

Подставим их выражение через уравнение Шред:

$\ominus \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^*(\bar{\nabla}^2\Psi) - (\bar{\nabla}^2\Psi^*)\Psi\right) \ominus$

из $i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(r)\right]\Psi$

$\ominus \frac{i\hbar}{2m}\bar{\nabla}\left(\Psi^*\nabla\Psi - (\nabla\Psi^*)\Psi\right) = -\vec{\nabla}\vec{j}$, где $\vec{j} = \frac{-i\hbar}{2m}\left(\Psi^*\vec{\nabla}\Psi - (\vec{\nabla}\Psi^*)\Psi\right)$

$\vec{j}$ – плотность тока вероятности.

ρ – плотность вероятности.

$\Rightarrow$ имеем $\frac{\partial\rho(x,t)}{\partial t} + \operatorname{div} j(x,t) = 0$ – уравнение непрерывности

Интегрируем $(x \to \vec{r})$

$\frac{\partial}{\partial t}\int\rho(r,t)\,d\vec{r} = -\int\operatorname{div}\vec{j}\,d^3r = -\oint\vec{j}\,d\vec{S} = 0$ S-вектор нормали к поверхности. Поверхность на ∞

Считаем, что на ∞ частиц нет $\Rightarrow$

$\frac{\partial}{\partial t}\int\rho(r,t)\,d^3r = 0$ то $\int\rho(r,t)\,d^3r = \text{const}$

Возьмем в качестве Ψ свободные волновые функции.

$\Psi = Ae^{ikx} \to j = |A|^2\frac{\hbar k}{m} = |A|^2\vec{V}$

Положим $\vec{j} = 1 \Rightarrow |A| = 1/\sqrt{V}$ $\Psi = \frac{e^{ikx}}{\sqrt{V}}$

Удобная нормировка – одна частица в одну секунду через един. поверхность

Задачи с начальными условиями

Пример:

Лекция 7.

- Теорема о коммутирующих операторах. Интегралы движения. Признак вырожденности спектра
- Соотношение неопределенностей
- Изменение средних со временем. Квантовые скобки Пуассона. Теорема вириала

Л.Л. III §§ 1, 3, 4, 9, 10, 11, 15, 16

Будем много говорить о дисперсиях.

Пусть есть физ. величина A. $\Delta A = A - \bar{A}$, $\bar{A}$ – среднее значение, число
ΔA – тоже оператор.

$\overline{(\Delta A)^2} = \overline{(A-\bar{A})^2} = (\overline{A^2} - \bar{A}^2) = \int\Psi^*(x)(A-\bar{A})(A-\bar{A})\Psi(x)\,dx \ominus$ <т.к. $A^+ = A$> –

$\ominus \int[(A-\bar{A})\Psi]^*((A-\bar{A})\Psi)\,dx \equiv \int|(A-\bar{A})\Psi|^2 dx \geq 0$

$= 0$, только если подинтегральная функция равна $\emptyset$, т.е. $(A-\bar{A})\Psi = 0 \Rightarrow$

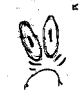
$\Rightarrow$ дисперсия физических величины $= 0$ на собственных функциях этой величины. Это ур-е на собственные значения $\bar{A}$ и функции Ψ – собственные

Для того, чтобы 2 физ. величины имели общий полный набор собственных функций, их коммутатор должен быть $= 0$, т.е. в данном состоянии обе имеют точно определенные значения.

Необходимость: $\hat{A}\ \hat{B}\ \{\Psi_n\}$ – общий полный набор собственных функций
Ψ_n – нормируемые функции (случай дискретного спектра)

$[AB]\Psi = (AB - BA)\Psi \ominus$ $\{\Psi_n\}$ – полн. набор $\Rightarrow \Psi = \sum_k c_k\Psi_k$

$\hat{A}\Psi_n = a_n\Psi_n$

$\hat{B}\Psi_n = b_n\Psi_n$ $\ominus \sum_n(\cancel{a_n b_n - b_n a_n})c_n = 0 \Rightarrow$ 

$\Rightarrow$ Если есть общий полный набор собственных функций, то коммутатор $= 0$.

Достаточность: Пусть $[AB]\Psi = 0$, Ψ – произвольная функция, покажем, что AB имеют общий полный набор собственных функций.

Пусть $\exists\,\varphi_n$: $\hat{A}\varphi_n = a_n\varphi_n$

$\hat{A}(\hat{B}\varphi_n) = a_n(B\varphi_n) \Rightarrow B\varphi_n$ – опять собств. функция A

$[AB]=0$

Пусть spec $\hat{A}$ – невырожден $\Rightarrow \underline{B\varphi_n = b_n\varphi_n}$, thus φ_n – собственная ф-я

B – тоже $\Rightarrow \varphi_n$ – общая для B и A.

Пусть spec $\hat{A}$ – вырожден $A(B\varphi_n) = a_n(B\varphi_n)$

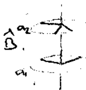
B не выводит φ_n из линейного подпространства функций, отвечающих a_n – собственному значению.

В то же время $\forall n$: $\varphi_n = \sum_{i=1}^{N_a} C_{ni}\Psi_i$ N_a – число независимых функций (т.е. можно разложить по базису подпространства!

Т.о. собственная функция оператора B – есть собственная A. В качестве общих функций можно выбрать собственные функции оператора B.

Итого: Если $[AB] = 0$ то A и B можно одновременно измерить в эксперименте.

Теперь пусть $\hat{A} = \hat{H}$ и возьмем некий оператор $\hat{B}$.



$\langle\Psi(t)|H|\Psi(t)\rangle$ – это от времени не зависит.

$\langle\Psi(t)|H|\Psi(t)\rangle = \sum_n E_n|C_n|^2$,

Если $[\hat{H},\hat{B}] = 0$, то у $\hat{H}$ и $\hat{B}$ есть общий набор собственных функций φ

$\langle\Psi(t)|\hat{B}|\Psi(t)\rangle = \sum_n b_n|C_n|^2$,

Когда $\hat{B}$ не должен зависеть от времени явно. Если B – от времени не зависит, и среднее тоже не зависит, то $\hat{B}$ – сохраняется, т.е. суть интеграл движения.

Признак вырожденности спектра:

$[\hat{H},\hat{A}] = 0$ $[\hat{H},\hat{B}] = 0$, $\underline{[\hat{A},\hat{B}] \neq 0}$ – пусть будет так.

$\hat{B}\Psi_{E,a} \neq b_n\Psi_{Ea}$, т.е. $\Psi_{E,a}$ – не собственная ф-я оператора B. (иначе бы $[AB]=0$)

$\hat{H}\hat{B}\Psi_{E,a} = E'(\hat{B}\Psi_{E,a})$ т.о. данному значению гамильтониана соответствует более чем одна функция

Живой пример – свободная частица

$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ $\hat{p}$ – сохр. $[\hat{H}\hat{p}] = 0$

$\hat{H},\hat{p}$ – имеют общие собственные функции: $\Psi \sim e^{\pm ikx} = e^{\pm i\frac{|p|x}{\hbar}}$

Функции отвечают значению $E = \frac{p^2}{2m}$, т.о. спектр свободного движения дважды вырожден. $\Rightarrow$ есть еще один оператор $\hat{B}$: $[\hat{H}\hat{B}] = 0$, но $[\hat{p},\hat{B}] = 0$

Ищем B:

Вводим оператор четности $\hat{\mathbb{P}}$: $\hat{\mathbb{P}}\Psi = \Psi(-x)$

$\hat{\mathbb{P}}\hat{H}(x)\Psi(x) = \underbrace{\hat{\mathbb{P}}\hat{H}(x)\mathbb{P}^{-1}}_{\hat{H}(-x)}\underbrace{\mathbb{P}\Psi(x)}_{\Psi(-x)}$

$H(-x) = H(x)$ т.к. H от x нахрен не зависит

$\hat{\mathbb{P}}\hat{H}\hat{\mathbb{P}}^{-1} = \hat{H}$ $|\times\mathbb{P}$ справа

$\hat{\mathbb{P}}\hat{H} = \hat{H}\hat{\mathbb{P}} \Rightarrow [\hat{\mathbb{P}}\hat{H}] = 0$ но $[\hat{\mathbb{P}}\hat{p}] \neq 0$

Нашли третий такой оператор.

$\hat{\mathbb{P}}\Psi_n(x) = (-1)^n\Psi_n(x)$ – для осциллятора $\mathbb{P} = e^{i\pi\hat{N}}$

В этом случае оператор унитарен, т.е. $\mathbb{P}^+ = \mathbb{P}^{-1} = \mathbb{P}$

Едем дальше: неопределенность

Пусть $\hat{A},\hat{B},\hat{C}$ таковы, что $[\hat{A}\hat{B}] = i\hat{C}$

При этом $A^+ = A$, $B^+ = B$, $C^+ = C$. Покажем, что $(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geq \frac{(\bar{C})^2}{4}$ | sqrt

$\left(\Delta A\Delta B \geq \frac{|\bar{C}|}{2}\right)$ $\hat{C} = \text{const} \neq 0$

Наиболее интересен случай $\hat{C} = \text{const} \neq 0$, например $[x, p_x] = i\hbar$

Доказываем соотношение:

Введем $\hat{L} = \alpha\hat{A} - i\hat{B}$ $\alpha \in \mathbb{R}$

$\hat{L}^+ = \alpha\hat{A} + i\hat{B}$

$\int\Psi^* L^* L\,\Psi\,dx = \int\Psi^*(\alpha\hat{A} + i\hat{B})(\alpha\hat{A} - i\hat{B})\Psi\,dx \geq 0$ это очевидно.

Переводим (?) $\hat{L} = \alpha\Delta\hat{A} - i\Delta\hat{B}$

$\hat{L}^+ = \alpha\Delta\hat{A} + i\Delta\hat{B}$

$\int\Psi^*\left[\alpha^2(\Delta A)^2 + (\Delta B)^2 + \alpha(-i\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} + i\Delta\hat{B}\Delta\hat{A})\right]\Psi\,dx =$

$-i\alpha[\Delta A\Delta B] = \alpha\hat{C}$

$= \alpha^2\overline{(\Delta A)^2} + \alpha\bar{C} + \overline{(\Delta B)^2} \geq 0$

Верно, если $\overline{(\Delta A)^2}\,\overline{(\Delta B)^2} \geq \frac{1}{4}(\bar{C})^2$

?! α – complex, тогда гон, т.к. все строилось при $\alpha \in \mathbb{R}$.

$\alpha_{1,2} = -\frac{\bar{C}}{2\overline{(\Delta A)^2}} \pm \sqrt{\frac{(\bar{C})^2 - 4\overline{(\Delta A)^2}\,\overline{(\Delta B)^2}}{4\overline{(\Delta A)^2}}}$

В случае $= 0$, выполняется при $\alpha = -\frac{\bar{C}}{2\overline{(\Delta A)^2}}$

$\int\Psi^* L^+ L\,\Psi = 0 = \int|L\Psi|^2 dx \Leftrightarrow L\Psi = 0$

(*) $(\alpha\Delta\hat{A} - i\Delta\hat{B})\Psi = 0$ – для функций, минимизирующих соотношение неопределенностей это выполняется. $\alpha = -\frac{\bar{C}}{2\overline{(\Delta A)^2}}$

Пусть $A = x$ $\bar{C} = \hbar$ $B = \hat{p}$ $\to$ (*)

(*) $\to \left[-\frac{\hbar}{2\overline{(\Delta x)^2}}(x - \bar{x}) - i(\hat{p} - \bar{p})\right]\Psi = 0$ $\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$

$\underbrace{\left(\frac{\hbar}{2\overline{(\Delta x)^2}}(x - \bar{x}) + \hbar\frac{d}{dx}\right)}_{\text{почти понижающий для осциллятора}}\Psi = i\bar{p}\Psi$

$\underbrace{\left(\frac{1}{2\overline{(\Delta x)^2}}x + \frac{d}{dx}\right)}_{\text{совсем понижающий.}}\Psi = \left(\frac{1}{2\overline{(\Delta x)^2}}\bar{x} + \frac{i\bar{p}}{\hbar}\right)\Psi$

решение $\Psi \sim \exp\left[\frac{(x-\bar{x})^2}{4\overline{(\Delta x)^2}} + i\bar{p}x\right]$

т.о. гауссов пакет минимизирует соотношение неопределенностей.

Выясним, как меняются средние значения физ величин со временем

$$\frac{d}{dt}\langle F\rangle = \frac{d}{dt}\int \Psi^*(x,t)\, F(t)\, \Psi(x,t)\, dx = \int \Big[\Big(\frac{1}{i\hbar}\hat H\Psi\Big)^* F(t)\Psi + \Psi^*\frac{\partial F(t)}{\partial t}\Psi + \Psi^* F(t)\frac{1}{i\hbar}\hat H\Psi\Big]dx$$

$$= \int \Psi^*(x,t)\Big[\frac{\partial F(t)}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\underbrace{(\hat H\hat F - \hat F\hat H)}_{[\hat H \hat F]}\Big]\Psi(x,t)\,dx$$

$\frac{d}{dt}\langle F\rangle = \langle \dot{\hat F}\rangle$ – вводим новый оператор, где $\dot{\hat F} = \frac{\partial F(t)}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[\hat H \hat F]$

а в классике было $\{\hat H \hat F\}$

Обзовем $\frac{i}{\hbar}[\hat H \hat F]$ – квантовой скобкой Пуассона.

$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_k \Big(\frac{\partial f}{\partial q_k}\dot q_k + \frac{\partial f}{\partial p_k}\dot p_k\Big)$ $\{Hf\}$

Дирак это постулировал $\{Hf\} \to \frac{i}{\hbar}[Hf]$

Теорема Эренфеста (почти закон Ньютона), пусть $H = \frac{p^2}{2m} + U(x)$

$$\langle \dot x\rangle = \frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [Hx]\rangle = \frac{i}{\hbar}\Big\langle \Big[\frac{p^2}{2m}\, x\Big]\Big\rangle = \Big\langle \frac{\hat p}{m}\Big\rangle$$

$i\hbar\frac{d}{dp}$

$$m\frac{d^2}{dt^2}\langle x\rangle = m\frac{d}{dt}\Big\langle \frac{p}{m}\Big\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [HP]\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [U(x)\,p]\rangle = -\Big\langle \frac{dU(x)}{dx}\Big\rangle = \langle F(x)\rangle$$

$-i\hbar\frac{d}{dx}$; в классике $F(\langle x\rangle)$

$$F(x) = F(\overbrace{x - \bar x}^{\Delta x} + \bar x) = F(\bar x) + \frac{1}{2}\langle (\Delta x)^2\rangle F''(x) + \dots$$

Если хвост мал, мы получаем классику.
Это верно; если → $F = 0$, $F = cx$ ($U \sim x^2$), $F = const$ ($U = cx$)

В этих случаях центр пакета движется классически

Теорема вириала. Считаем, что A от t явно не зависит

$$\frac{d}{dt}\langle n|A|m\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle n|[\hat H\hat A]|m\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle n|\underbrace{H}_{E_n}A - A\underbrace{H}_{E_m}|m\rangle = \frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)\langle n|A|m\rangle$$

$= 0$ при $n=m$, что мы уже знаем. Пусть $A = \bar r\bar p$

$$\frac{d}{dt}\langle(\bar r\bar p)\rangle = 0 = \frac{i}{\hbar}\langle [H,(\bar r,\bar p)]\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle(\underbrace{[H\bar r]}_{\dot{\bar r}}\bar p + \bar r\underbrace{[H\bar p]}_{\dot{\bar p}})\rangle =$$

$\underbrace{\langle \dot r p\rangle}_{2\langle T\rangle} - \langle(\bar r, \nabla\bar U)\rangle = 0$ – это и есть соотношение вириала

Если $U \sim \alpha r^k \Rightarrow 2\langle T\rangle = k\langle U\rangle$
Если $k=2$ $\langle T\rangle = \langle U\rangle = \langle E\rangle/2$ – (для осциллятора)
$k=-1$ $\langle T\rangle = -\langle U\rangle/2 = -\langle E\rangle/2$ – кулон
Доказанная теорема относится к случаю дискретного спектра

Введем $\hat T_{\bar a}$ – оператор сдвига на $\bar a$
Обычно будем делать активное преобразование

$\Psi'(\bar r) = \hat T_{\bar a}\Psi(\bar r) = \Psi(\bar r - \bar a)$ $\bar a \to \delta\bar a$ – делаем беск. малый сдвиг

$$\hat T_{\delta a}\Psi(r) = \Psi(\bar r - \delta\bar a) = \Psi(\bar r) - \delta\bar a\,\bar\nabla\Psi(\bar r) = (1 - \delta\bar a\bar\nabla)\Psi(r) = \Big(1 - i\delta a\frac{\hat p}{\hbar}\Big)\Psi(\bar r)$$

$\hat T_{\delta a}$ называется инфинитезимальным оператором.
Теперь делаем конечный сдвиг на $\bar a$, поскольку операторы сдвига коммутируют можно последовательностью б.м. сдвигов сдвинуться на конечный $\bar a$

1) $T_{\bar a} = \lim_{n\to\infty}\Big(1 - i\frac{a}{n}\frac{\bar p}{\hbar}\Big)^n = e^{-i\bar p\bar a/\hbar}$

2) $\Psi(\bar r - \bar a) = \Psi(r) - \frac{\bar a}{1!}\nabla\Psi(r) + \frac{a_i a_j}{2!}\nabla_i\nabla_j\Psi(\bar r) + \dots = e^{-i\bar p\frac{a}{\hbar}}\Psi(r)$,

3) $T(\bar a + \delta\bar a) = T(a)T(\delta a) = T(a)\Big(1 - \frac{i\bar p\delta\bar a}{\hbar}\Big) = T(a) + \frac{\partial T}{\partial a}\delta a$

$\hat T_{\bar a} = e^{-i\bar p\bar a/\hbar}$

$\hat R_{\delta\alpha}^{\bar n} = 1 - i\hbar[\bar r,\bar\nabla]$

Вводим оператор конечных поворотов $\hat R_{\alpha}^{\bar n} = e^{-i\frac{(\hat M\bar n)\alpha}{\hbar}}$ $\hat M = [\bar r\cdot\bar p] = -i\hbar[\bar r,\bar\nabla]$

$\bar n$ – направление оси, вокруг которой мы поворачиваем, α – угол поворота.

Вводим оператор сдвига во времени. $\hat S_t = e^{-i\frac{\hat H t}{\hbar}}$

$$\Psi(x,t) = \sum a_n\Psi_n(x)\, e^{-iE_nt/\hbar} = e^{-i\hat Ht/\hbar}\underbrace{\Big(\sum_n a_n\Psi_n(x)\Big)}_{\Psi(x,0)}$$

Вышеперечисленные операторы унитарны $U^{-1} = U^+$ $U^+U = UU^+ = 1$

$U\Psi = \Psi'$ $U\Psi = \Psi'$, $UFU^+ = F'$ $U\hat F\Psi = U\hat FU^+U\Psi = \Psi' = \hat F'\Psi'$

Проверим, что унитарные преобр. сохраняют скалярное произведение и матричные элементы

1) $\langle\varphi|\hat F|\Psi\rangle = \langle\varphi|U^+UFU^+U|\Psi\rangle = \langle\varphi'|F'|\Psi'\rangle$, $\hat F$ – произвольный

2) $(F')^+ = \underbrace{(UFU^+)^+}_{F'^+} = UF^+U^+ = UFU^+ = F'$ – сохранение эрмитовости

3) $U(F\Psi = \lambda\Psi)$ $F'\Psi' = \lambda\Psi'$ ⇒ собственные числа тоже сохр. при унитарном преобразовании

Связь симметрии с интегралами движения.

$$\frac{d}{dt}\langle\Psi|A|\Psi\rangle = 0 \Leftrightarrow A\text{ – интеграл движения.} = \langle\Psi|\underbrace{\frac{\partial A}{\partial t}}_{0} + \frac{i}{\hbar}\underbrace{[HA]}_{0}|\Psi\rangle$$

Симметрия системы – инвариантность Гамильтониана относительно тех или иных преобразований.
Пусть U – унитарное преобразование, H – инвариантен отн. U.
$UH\Psi = UHU^+U\Psi = H'\Psi' = HU\Psi$ сравнивая начало и конец:
$HU - UH = [HU] = 0$; т.о. если U явно не зависит от времени,
⇒ ~~каждому~~ этому унитарному оператору ~~соответствует~~ § движения.

Лекция 8 20.10.02

① Унитарные операторы преобразований
② Связь симметрий физической системы с интегралами движения
③ Движение в периодическом поле. Оператор сдвига. Теорема Блоха
Л.Л III §15; IX, §55 е.к. §11 Зелевинский т I, лекц. 13 ГКК(92) 2.53, 2.54

Переходим к 3 пункту.

Рассмотрим такое поле $V(x+a) = U(x)$ $\hat T_a\Psi(x) = \Psi(x+a) = e^{i\hat p\frac{a}{\hbar}}\Psi(x)$

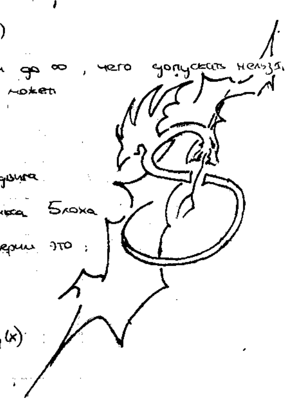
$[\hat H\hat T_a] = 0$ $\hat T_a\Psi(x) = \Psi(x+a) = \lambda\Psi(x)$

Если берем $\lambda > 1$, то в.ф. будет расти до ∞, чего допускать нельзя, поэтому $\lambda \leq 1$, $\lambda < -1$ тоже быть не может

Немного подумав, получим, что $|\lambda| = 1$

$\lambda = e^{iqa}$ q – характеризует функцию сдвига

$\Psi_q(x) = e^{iqx}u_q(x)$ – теорема Феликса Блоха



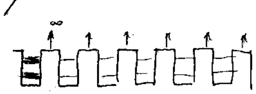
$u_q(x)$ – периодична с периодом решетки, проверим это:

$$e^{iq(a+x)}u_q(x+a) = e^{iqa}e^{iqx}u_q(x)$$

$$\Big(-\frac{\hbar}{2m}(\nabla + iq)^2 + V(x)\Big)u_q(x) = E(q)u_q(x)$$

При фиксированном q

$$\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla + iq)^2 + V(x)\Big)u_{nq}(x) = E_n(q)u_{nq}(x)$$



$E_n(q)$, $\Psi_{n,q}(x)$

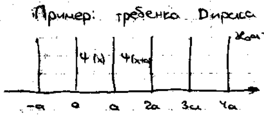
Величина q (квазиимпульс) определена с точностью до $\frac{2\pi n}{a}$, т.е.
$q \to q + \frac{2\pi n}{a}$ – с точностью до векторов обратной решетки

$\Psi_{nq + \frac{2\pi n}{a}} = \Psi_{nq}$

$E_n\big(q + \frac{2\pi n}{a}\big) = E_n(q)$

Принято соглашение, что $-\frac{\pi}{a} \leq q < \frac{\pi}{a}$ – первая Зона Бриллюэна

Пример: гребенка Дирака $V(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} G\,\delta(x - na)$ $0 < x < a$



$Ae^{ikx} + Be^{-ikx} = \Psi(x)$

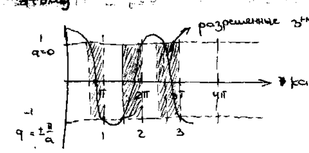
$e^{iqa}(Ae^{ikx} + Be^{-ikx}) = \Psi(x+a) = e^{iqa}\Psi(x)$

Делаем сшивку: в первом равенстве $x \to a$, во втором $x \to 0$.

$Ae^{ika} + Be^{-ika} = e^{iqa}(A+B)$

$$ik\big[e^{iqa}(A - B) - (Ae^{ika} - Be^{-ika})\big] = \underbrace{\frac{2mG}{\hbar}}_{2\varkappa_0}(Ae^{ika} + Be^{-ika})$$

(*) $\cos qa = \frac{\varkappa_0 a}{ka}\sin ka + \cos ka$ – определяет зонную структуру системы

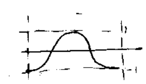


ширина зон растет с ростом ka

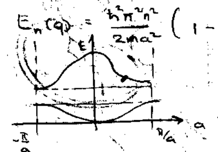
Приближение сильной связи
$\varkappa_0 a \gg ka$, т.е. $\varkappa_0 \gg 1$
$ka = n\pi - \Delta n(q)$ – ставим в (*) $ka = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

$$\cos qa = (-1)^n - \frac{\varkappa_0 a}{\pi n}(-1)^n\Delta n(q)$$

$$\Delta n(q) = \frac{\pi n}{\varkappa_0 a}\big(1 - (-1)^n\cos qa\big)$$



$$E_n(q) = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2ma^2}\Big(1 - \frac{2}{\varkappa_0 q}\big(1 - (-1)^n\cos qa\big)\Big)$$



Определяем групповую скорость как $V_{гр}^n(q) = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E_n(q)}{\partial q}$

$j = V_{гр}^n(q)$

Вспомним классику...
Электромагнитное поле можно охарактеризовать 4-х вектором потенциала.
Через него поле E и B выражаются так:
$\bar{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \bar{A}}{\partial t} - \bar{\nabla}\varphi \qquad \bar{H} = \operatorname{rot}\bar{A}$

$A_\mu = (\varphi, A)$ Волновое уравнение $\Box A_\mu = 0 \qquad \Box = \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$

$L = T - u$ – функция Лагранжа

$u = e\varphi - \frac{e}{c}\bar{v}\bar{A}$ – потенциал электромагнитного поля

$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$ – обобщенный импульс

Строим классический Гамильтониан $H(q,p) = \frac{(\bar{p} - \frac{e}{c}\bar{A})^2}{2m} + e\varphi$

$\{p_i q_j\} = \delta_{ij}$. Еще из уравнений Гамильтона можно получить силу Лоренца $F = e\bar{E} + \frac{e}{c}\bar{v}\times\bar{H}$

Строим аналогии в квантах:

$\hat{H} = \frac{(\hat{p} - \frac{e}{c}\hat{A})^2}{2m} + e\varphi$ – в присутствии поля; $\hat{p}_i = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}$

(импульс имеет такой же вид что и без поля. Но это не мешает классике)

$\frac{i}{\hbar}\{p_i q_j\} = [p_i q_j] = \frac{i}{\hbar}\delta_{ij}$

В квантах электромагнитное поле вводится удлиннением производных

$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$ – было

$\underbrace{\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\varphi\right)}_{\text{производные "удлиннились"}}\psi = \frac{(\hat{p} - \frac{e}{c}\hat{A})^2}{2m}\psi, \quad p_i = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}$ – стало.

Замечания:

1) $\varphi = 0$, есть только $\bar{A}$
Правая часть гамильтониана содержит $i \Rightarrow$ даже в связанных состояниях в присутствии поля ψ комплексны

$j = \rho\frac{\hbar}{m}\nabla\text{phase}$ т.е. чтобы был ток, надо, чтобы волновые функции были complex. (соответственно, функция основного состояния может так быть действительной)

$\psi = \sqrt{\rho}\, e^{i\,\text{phase}}$

2) $\hat{H} = \frac{(\hat{p} - \frac{e}{c}\bar{A})^2}{2m} = \frac{1}{2m}(\hat{p} - \frac{e}{c}A)(\hat{p} - \frac{e}{c}A) = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e}{2mc}(\hat{p}\hat{A} + \hat{A}\hat{p}) + \frac{e^2}{2mc^2}\bar{A}^2$

$A = (x, y, z, t)$

и если $\operatorname{div}A = 0$, то H имеет вид $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e}{mc}\bar{A}\hat{p} + \frac{e^2}{2mc^2}\bar{A}^2$

3) $\hat{v} = \hat{\dot{r}} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}r] = \frac{\hat{p} - \frac{e}{c}\bar{A}}{m}$ – оператор скорости.

$[\hat{v}_i, \hat{v}_j] = \frac{ie\hbar}{m^2c}\varepsilon_{ijk}H_k$

4) Движение частицы в однородном магнитном поле

$A_x = -Hy \quad A_y = A_z = 0$ – выберем так

Уравнение Шредингера в таком случае имеет вид
$\hat{H} = \frac{1}{2m}(p_x + \frac{e}{c}Hy)^2 + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m}$

$\hat{H}\psi = E\psi$ Заметим, что x и z не содержатся в $\hat{H} \Rightarrow p_x$ и p_z – сохр.

т.к. $[p_x H] = [p_z H] = 0 \Rightarrow$ волновые функции выбираем общими для $\hat{p}_x$, $\hat{H}$ и $\hat{p}_z$. Отсюда

$\psi(x,y,z) = e^{\frac{ip_x x}{\hbar} + \frac{ip_z z}{\hbar}}\chi(y)$ ← суем в уравнение

$-\frac{\hbar^2}{2m}\chi'' + \frac{m\omega_H^2}{2}(y - y_0)^2\chi = \underbrace{\left(E - \frac{p_z^2}{2m}\right)}_{\text{энергия поперечного движения}}\chi = E_\perp\chi(y)$, где

$\omega_H = \frac{e|H|}{mc} \quad y_0 = -\frac{cp_x}{eH}$, ω_H – циклотронная частота.

(подсказка :) получим уравнение, напоминающее осциллятор)

отсюда $E_\perp = \hbar\omega_H(n + \frac{1}{2})$, $n = 0, 1, 2 \ldots$ – уровни Ландау.

5) $A_x = -Hy \quad A_y = A_z = 0 \quad \operatorname{rot}\bar{A} = \bar{H}$

С другой стороны можно взять $\bar{A}$ в виде $\bar{A} = \frac{1}{2}\bar{H}\times\bar{r}$

Взяв от него ротор получим тоже самое, т.е. потенциал определяется неоднозначно.

$\bar{A}' = \bar{A} + \bar{\nabla}\lambda(x,y,z,t)$

$\varphi' = \varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial\lambda}{\partial t}$ $\qquad\lambda$ – некоторая функция

При такой замене $A \to A' \quad \varphi \to \varphi'$, а поля не меняются.

Т.о. имеется некая свобода в выборе потенциалов. Обсудим ее подробнее.
Потребуем, чтобы физические следствия уравнения Шредингера не зависели от замены $A \to A'$ $\varphi \to \varphi'$ (калибровочная инвариантность теории).
Это будет так, если будет некоторое унитарное преобразование, переводящее $\hat{H}$, соответственно A и φ в другой $\hat{H}$, соответственно A' и φ':

$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\varphi'\right)\psi' = \frac{(\hat{p}' - \frac{e}{c}\bar{A}')^2}{2m}\psi'$, т.е. $i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t} = \hat{H}'\psi'$

Ищем вид унитарного преобразования: $H \to H'$, но при этом преобразовании должно сохраняться условие $|\psi|^2 = |\psi'|^2 \Rightarrow$ преобразование должно сводится к умножению на complex число с модулем 1.

$i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t} = \hat{H}'\psi' \to i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$

$\psi' = e^{\frac{ie\lambda(x,y,z,t)}{\hbar c}}\psi = u\psi$ – рассмотрим такой частный вид унитарного преобразования.

$u^+\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\left(\varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial\lambda}{\partial t}\right)\right)u\psi = \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\varphi\right)\psi$

$u^+(\hat{p} - \frac{e}{c}\bar{A}')uu^+(\hat{p} - \frac{e}{c}\bar{A}')u\psi = \frac{(\hat{p} - \frac{e}{c}\bar{A})^2}{2m}\psi$

Т.о. теория обладает калибровочной инвариантностью, относительно полученного нами преобразования U.

< куда его несет сегодня?! >

$\rho = \psi^*\psi \qquad j = -\frac{i\hbar}{2m}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)$

$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \operatorname{div}j = 0$

$j = \frac{1}{2m}\left(\psi^*(-i\hbar\nabla\psi) + (-i\hbar\nabla\psi)^*\psi\right)$

$H \xrightarrow{\varphi, \bar{A}} H \qquad \rho = e\psi^*\psi$ – калибровочная инвариантность (это плотность заряда)

$j = \frac{e}{2m}\left(\psi^*(\hat{p} - \frac{e}{c}A)\psi + \text{к.с.}\right)$ – ток – калибровочная инвариантность

Из уравнения непрерывности

$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \rho\, dv = 0 \to$ можно интерпретировать как закон сохранения заряда.

§ Вариационный принцип. Прямой вариационный метод.

Уравнения классической механики – следствия принципа наименьшего действия
Уравнение Шредингера тоже можно получить из вариационных соображений

$I = \int_V \psi^*\hat{H}\psi\, dV$ – ищем ψ доставляющую минимум функционалу.

вспомним, что $\int\psi\psi^* dv = 1$
Имеем вариационную задачу на условный экстремум
$\delta I = 0 = \int\delta\psi^* H\psi dv + \int\psi\hat{H}\delta\psi\, dV$

Вариация от нормировки $E\int\delta\psi^*\psi\, dv + E\int\psi^*\delta\psi\, dv = 0$
Домножим на „хитрый" множитель E

Теперь вычитаем $\int\delta\psi^*(\hat{H} - E)\psi dv + \int((\hat{H} - E)\psi)^*\delta\psi\, dV = 0$

Коэфф. при вариациях 0, ⇒ получаем уравнение Шредингера. $(\hat{H} - E)\psi = 0$

Прямой вариационный метод

Пусть $\psi(\alpha, \ldots x)$ – функция зависит от каких-то параметров.

$\int\psi^*(\alpha, \ldots x)\hat{H}\psi(\alpha, \ldots x)dx = \underbrace{\langle\alpha|\hat{H}|\alpha\rangle}_{\text{ищем минимум}} = E(\alpha, \ldots)$

$\frac{\partial E}{\partial\alpha_1} = 0 \ldots \frac{\partial E}{\partial\alpha_2} = 0 \ldots$ ← находим $\alpha_1, \ldots \alpha_n$ – подставляя в ψ находим все, что надо.

Пример – осциллятор.

$\psi = \frac{e^{-x^2/4\alpha^2}}{(2\pi\alpha^2)^{1/4}}$ – ищем в таком виде, α – параметр

$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2x^2}{2} \qquad \langle\alpha|\hat{H}|\alpha\rangle = \frac{\hbar^2}{2m4\alpha^2} + \frac{m\omega^2\alpha^2}{2} = E(\alpha)$

$E'(\alpha) = 0 \to$ ищем α $\alpha^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$, суя в $\langle\hat{H}\rangle$, получим $E_{осн} = \frac{\hbar\omega}{2}$

Этот метод позволяет получить оценку сверху на энергию:

$\left(\int\psi^* H\psi\, dv\right)_{min} \geqslant E_0$

$\psi = \sum a_n\psi_n$, не знаем ψ_n, но строим

$\langle E\rangle_{min} = \sum|a_n|^2E_n \geqslant E_0\underbrace{\sum|a_n|^2}_{1}$

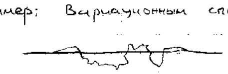
Полученная таким способом энергия E_0 всегда больше либо равна настоящей энергии основного состояния.

Энергия других состояний:

$\left(\int\psi_i^* H\psi_i\, dv\right)_{min} = E_i$ при условии $\int\psi_i^*\psi_{i-1,\ldots 0}\, dv = 0$

Получается, что класс функций, среди которых ищем i-ю функцию уже, чем класс функций для $(i-1)$, т.к. каждый раз добавляется новое условие ортогональности. $\Rightarrow E_i > E_{i-1}$

Пример: Вариационным способом покажем, что: при условии $\int U(x)dx < 0$, $U(x)|_{x\to\pm\infty} \to 0$



Всегда ∃ уровень

Попробуем пробную функцию $\psi = \sqrt{\varkappa}\, e^{-|x|\varkappa}$, $\varkappa \to 0$

$\bar{T} = \frac{\overline{p^2}}{2m} \sim \varkappa^2$

$\bar{u} \sim \varkappa \quad , \bar{E} = \overset{\varkappa^2}{\bar{T}} + \overset{\varkappa}{\bar{u}}$

т.о. $\bar{E} \sim \bar{u}$, т.о. $\bar{E} < 0$ ∃ связанное состояние для пробной функции.
Если будем брать функции лучше, E для них будет меньше и все работает

1) Критерий применимости
2) Волновые функции и правила сшивки
3) Правило квантования Бора-Зоммерфельда

М. § 6, 17, 46-50, 24
Давыдов §§ 21-24
СХ § 12-13.

Если $\hbar \to 0$, то квантовая механика переходит в классическую механику (как релятивизм → классика при $c \to \infty$. Точнее критерий такой:
$\frac{\hbar}{pL} \to 0$, где p - импульс, L - хар-ный размер, выр-ние имеет размерность действия.
Итак: когда и каким образом?

Напоминание: т. Эренфеста $\frac{d^2}{dt^2}\langle x\rangle = \langle -\frac{\partial u}{\partial x}\rangle = \langle F(x)\rangle \qquad x = \Delta x + \bar{x}$

$$\frac{d^2}{dt^2}\langle x\rangle = F(\langle x\rangle) + \frac{1}{2}\langle(\Delta x)^2\rangle F''(\langle x\rangle) + \dots$$

Т.е. закон движения центра тяжести пакета похож на классический, если хвост мал, т.е. если

$$(**) \quad 2\left|\frac{F(\langle x\rangle)}{F''(\langle x\rangle)}\right| \gg \langle(\Delta x)^2\rangle$$

, кстати на больших временах это нер-во может и не выполнятся.

$$\langle T\rangle = \frac{\langle p\rangle^2}{2m} = \langle\frac{(p-\bar{p}+\bar{p})^2}{2m}\rangle = \frac{\bar{p}^2}{2m} + \frac{\overline{(\Delta p)^2}}{2m} \quad \text{т.к. } \frac{\overline{\Delta p\bar{p}}}{2m} = 0$$

$\overline{(\Delta p)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4\overline{(\Delta x)^2}}$, чтобы выкинуть второй член, надо $\bar{p}^2 \gg \overline{(\Delta p)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4\overline{(\Delta x)^2}}$ (*)

(A) $\bar{p}^2\left|\frac{F(\bar{x})}{F''(\bar{x})}\right| \gg \frac{\hbar^2}{8}$ - общий критерий, перемножили (*) на (**) при его получении

т.е. для применимости квазиклассики нужны большие импульсы и потенциал должен быть гладким.

Пусть L - хар-ное расстояние существенного изменения потенциала, тогда $F'' \sim \frac{F}{L^2}$ → ставим в (A), $\left(\frac{\bar{p}L}{\hbar}\right)^2 \gg 1$ извлечем корень $\frac{\bar{p}L}{\hbar} \gg 1 \Rightarrow \frac{\hbar L}{\lambda\hbar} \gg 1 \Rightarrow \frac{\lambda}{L} \ll 1$

Получили (B) $\frac{\lambda}{L} \ll 1$ - критерий применимости

$\int_x^{x_0} p(x')dx' \gg \hbar$
$\bar{p}L$ - классическое действие должно быть ≫ квантового

$\delta\lambda \sim \frac{d\lambda}{dx}dx \;\Big|\; /\lambda \qquad \frac{\delta\lambda}{\lambda} \sim \frac{d\lambda}{dx}\frac{dx}{\lambda}$, рассмотрим $dx \sim \lambda$, тогда

$\frac{\delta\lambda}{\lambda} \sim \frac{d\lambda}{dx} \sim \frac{\lambda}{L} \ll 1$ - т.е. длина волны де Бройля меняется мало на размерах порядка самой длины волны (еще одна интерпр-я (B))

Пусть есть частица в яме. Для связанного состояния $\lambda \sim \frac{L}{n}$ n-число нулей т.е. частица движется в яме классически на высоких уровнях
Например $E_n = \hbar\omega(n+1/2)$, $-\frac{e^4 m}{2\hbar^2 n^2}$, $\frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2ma^2}$, т.е. если в спектре есть произведение $\hbar n$, то система имеет классический предел (при стремлении $\hbar \to 0$, $n \to \infty$)

$$\psi \sim \frac{C}{\sqrt{p(x)}} e^{-i\frac{Et}{\hbar} + i\frac{S_0(x)}{\hbar}}$$ - смотрим связ. состояния

S_0 - классическое действие частицы (стоит там не просто так, а в силу каких-то хитрых соображений)

$$S_0 = \int_{x_0}^{x} p(x)dx = \int_{x_0}^{x}\sqrt{2m(E-u(x))}\,dx$$

Действие удовлетворяет уравнению $\left(\frac{\nabla S_0(x)}{\sqrt{2m}}\right)^2 = (E - u(\vec{r}))$, $\frac{(\nabla S_0(x))^2}{2m}$

Займемся поиском квазиклассических функций
Ищем $\psi(x)$ в виде:
$\psi(x) = e^{iS(x)/\hbar}$ $\quad S(x)$ - некоторая функция

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + u(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

$$-\hbar^2\frac{d^2\psi}{dx^2} = 2m(E-u(x))\psi(x) = (p(x))^2\psi$$

$$\frac{d\psi}{dx} = e^{i\frac{S}{\hbar}}\frac{iS'}{\hbar}\;\Big|\;\frac{d}{dx}\cdot(-\hbar^2)$$

$-\hbar^2\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\hbar^2\left[e^{iS/\hbar}\left(\frac{iS'}{\hbar}\right)^2 + e^{iS/\hbar}\frac{iS''}{\hbar}\right]$ - суем в уравнение

$(S')^2 - i\hbar S'' = p^2(x)$ - уравнение Риккати (вроде так)
Ищем S в виде $S = S_0 + \frac{\hbar}{i}S_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_2 + \dots$

В нулевом приближении: $(S_0')^2 = p^2(x) \Rightarrow S_0(x) = \pm\int p(x)dx$

Второе слагаемое зарубим, т.к. $(S')^2 \gg |\hbar S''|$ - считаем, что так

$$\left|\frac{\hbar S''}{S'^2}\right| \sim \left|\frac{d}{dx}\frac{\hbar}{S'}\right|^2 \ll 1 \Rightarrow \left|\frac{d}{dx}\frac{\hbar}{p(x)}\right| \ll 1 \Rightarrow \left|\frac{d\lambda(x)}{dx}\right| \ll 1$$

$S_0' \sim p(x)$

$$\left|\frac{d}{dx}\frac{\hbar}{p(x)}\right| = \left|\frac{\hbar p'(x)}{p^2(x)}\right| = \left|\frac{\hbar}{p^3}\frac{du}{dx}\right| = \left|\frac{\hbar F}{p^3}\right| \ll 1$$

$S = S_0 + \frac{\hbar}{i}S_1$ - ставим в уравнение

$(S_0')^2 + \frac{2\hbar}{i}S_0'S_1' - i\hbar S_0'' = p^2(x) \Rightarrow S_1' = -\frac{1}{2}\frac{S_0''}{S_0'} = -\frac{1}{2}\frac{d}{dx}\ln S_0' \Rightarrow$

$(S_0')^2 = p^2(x)$

$\Rightarrow S_1 = -\frac{1}{2}\ln p(x) + \text{const} = \ln\frac{1}{\sqrt{p(x)}} + \text{const}$

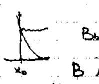
Итак, волновая функция ВКБ: (общий вид)

$$\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}}e^{i/\hbar\int p(x)dx} + \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}}e^{-i/\hbar\int p(x)dx}$$

Замечание: Следующие слагаемые в разложении S не учитываем:

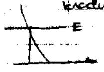
$$e^{i/\hbar\left(\underset{\text{велико}}{S_0} + \hbar/i\,S_1 + \underbrace{(\hbar/i)^2 S_2}_{\ll 1}\right)}$$

В ВКБ подразумевается, что p - действительная величина
$p(x) = \sqrt{2m(E-u)}$, т.е. $E > u$, т.е. движение в классически доступной области.
В классически недоступной области $p \to i|p|$
Там $\psi(x)$ имеет вид $\psi(x) = \frac{C_3}{\sqrt{|p(x)|}}e^{-1/\hbar\int p(x)dx} + \frac{C_4}{\sqrt{|p(x)|}}e^{1/\hbar\int p(x)dx}$



Выбор пределов интегрирования: от точки поворота, т.е. от x_0 до x.

В любой задаче есть классически доступная и недоступная области. Надо сшить эти две области: В лоб не удается: около точки поворота классика не работает (импульс мал)



Ищем правила сшивки. Пусть $u(x)$ достаточно гладкая функция
$u(x) = u(a) + \frac{du}{dx}(x-a) + \dots \simeq E - F(x-a)$ - ставим в уравнение Шр.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + (E - F(x-a))\psi = E\psi$$

$\boxed{\psi'' + \frac{2mF}{\hbar^2}(x-a)\psi = 0}$ - уравнение движения частицы в однородном поле

!! Имеем приближенное уравнение Шр., работающее вблизи точки поворота, имеющее точное решение. Раз уравнение работает вблизи точки поворота, то будет работать и далеко. А там (далеко) есть известные квазиклассические функции

$\left|\frac{F}{E}(x-a)\right| \ll 1$ - там, где работает уравнение в рамочке

$\left|\frac{1}{E}\frac{E}{L}(x-a)\right| \ll 1 \Rightarrow |x-a| \ll L$ (т.е. там, где потенциал линеен)

$\left|\frac{d}{dx}\frac{\hbar}{p}\right| \ll 1$ - там работает ВКБ

$$\left|\frac{d}{dx}\frac{\hbar}{p}\right| = \left|\frac{d}{dx}\frac{\hbar}{(2mF(x-a))^{1/2}}\right| = \left|\frac{\hbar}{2\sqrt{2mF}(x-a)^{3/2}}\right| \ll 1$$

$\left|\frac{\hbar^2}{mF}\right|^{1/3} \ll |x-a| \ll L \qquad , E = \frac{p_0^2}{2m}$
ВКБ $\qquad$ уравнение в рамке.
$\frac{E}{L}$

$$\left(\frac{\hbar^2}{m\frac{p_0^2}{2m}}\frac{L}{1}\right)^{1/3} = L\left(\frac{\hbar}{p_0 L}\right)^{2/3} \ll |x-a|$$

т.е. можно выбрать такие x, чтобы нер-во имело место быть, т.е. есть область перекрытия
Перепишем уравнение в рамочке в безразмерных переменных

$$\xi = \left(\frac{2mF}{\hbar^2}\right)^{1/3}(x-a)$$

$$\psi'' + \xi\psi = 0 \quad (*) \to \quad ' , '' = \frac{d}{d\xi}$$

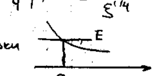
$\left(\frac{\hbar^2}{mF}\right)^{1/3} \ll |x-a|$, т.е. $\xi \gg 1 \Rightarrow$ квазиклассическая область.
(ВКБ) - асимптотика уравнения (*) (т.е. при $\xi \to \infty$ или $\xi \gg 1$)
$\psi_1(x) = A\Phi(-\xi)$ - решение (*)
→ функция Airy, $\Phi(\xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty\cos\left(\frac{u^3}{3} + \xi u\right)du$

Асимптотика

$$\psi_{3,4}(\xi \to -\infty) = A\frac{1}{2}\frac{1}{|\xi|^{1/4}}e^{-2/3|\xi|^{3/2}}, \quad B\frac{1}{|\xi|^{1/4}}e^{2/3|\xi|^{3/2}}$$

$$\psi_{1,2}(\xi \to +\infty) = A\frac{1}{\xi^{1/4}}\cos\left(\frac{2}{3}\xi^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right), \quad -B\frac{1}{\xi^{1/4}}\sin\left(\frac{2}{3}\xi^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right)$$

Наконец-то выпишем правила сшивки



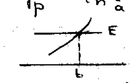
В классически недоступной:

$$\frac{1}{\sqrt{|p|}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_x^a|p(x)|dx\right) \longleftrightarrow \frac{2}{\sqrt{p}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p(x)dx - \frac{\pi}{4}\right)$$

Под барьером растущая exp.

$$-\frac{1}{\sqrt{p}}\exp\frac{1}{\hbar}\int_x^a|p(x)|dx \longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{p}}\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p(x)dx - \frac{\pi}{4}\right)$$

Если картинка другая

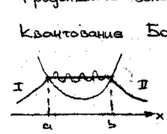


$$\frac{2}{\sqrt{p}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^b p(x)dx - \frac{\pi}{4}\right) \longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{|p|}}\exp\frac{-1}{\hbar}\int|p(x)|dx$$

$$\frac{1}{\sqrt{p}}\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^b p(x)dx - \frac{\pi}{4}\right) \longleftrightarrow -\frac{1}{\sqrt{|p|}}\exp\frac{1}{\hbar}\int|p(x)|dx$$

Если есть растущая exp, то падающей exp лучше пренебречь (это по поводу стрелок)
т.к. ВКБ - приближение со степенной точностью
Продолжение более законно, где есть значок ⟶ с двойной стрелкой

Квантования Бора - Зоммерфельда:



$\int_a^b p(x)dx = \pi\hbar(n + 1/2)$ - правило квантования Бора - Зоммерфельда
тогда слева и справа будут функции одного вида (в I и II будут спадающие решения)

Лекция 11 $\qquad$ 11. 11. 02.

1) Правило квантования Бора - Зоммерфельда (продолжение)
2) Прохождение через потенциальный барьер
3) Квазистационарные состояния, α - распад.

$$\Psi_{II} = \frac{2c}{\sqrt{p}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\,dx - \left(\frac{1}{\hbar}\int_x^b p\,dx - \frac{\pi}{4}\right) - \frac{\pi}{2}\right) = \frac{2c}{\sqrt{p}}\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\,dx - \left(\frac{1}{\hbar}\int_x^b p\,dx - \frac{\pi}{4}\right)\right) =$$

$$= \frac{2c}{\sqrt{p}}\left[\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\,dx\right)\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^b p\,dx - \frac{\pi}{4}\right) - \underbrace{\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\,dx\right)}_{A}\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^b p\,dx - \frac{\pi}{4}\right)\right]$$

Чтобы продолжить функцию в падающую экспоненту, нужно, чтобы $A = 0$

т.е. если $\frac{1}{\hbar}\int_a^b p_n dx = \pi(n+1/2)$ — правило квантования Бора-Зоммерфельда. $p_n = \sqrt{2m(E_n - U(x))}$ $n = 0, 1, 2..$

$\Rightarrow \frac{(-1)^n c}{\sqrt{|p|}} e^{-1/\hbar\int|p|dx} = \Psi_{III}$

Детали:

1) $\Psi_a = \frac{c}{\sqrt{p}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\,dx - \pi\gamma_1\right)$ ← постоянная фаза, ($= \frac{\pi}{4}$, если U — гладкая функц.)

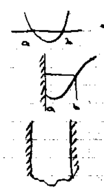
в классически доступной области

$\Psi_b = \frac{\tilde{c}}{\sqrt{p}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^b p\,dx - \pi\gamma_2\right)$

Условие совпадения функций $c = (-1)^n\tilde{c}$

и условие квантования: $\int_a^b p\,dx = \hbar\pi(n + \gamma_1 + \gamma_2)$

т.е. $1/2$ в правиле — В формуле

Если потенциал такой  $\Rightarrow \gamma_1 = \gamma_2 = 1/4$ — $1/2$

Если такой $\Rightarrow \gamma_1 = 1/2$ $\gamma_2 = 1/4$ — $3/4$

$\gamma_1 = 1/2 = \gamma_2$ — 1

Коэффициент зависит от того, с какой волновой функцией сшиваем.
С другой стороны n — универсальная штука, n — это число нулей волновой функции.

2) Нормировка:

За ямой функция затухает и хвосты в нормировку дают малый вклад.

$\int |c|^2\frac{\cos^2}{p}\left(\frac{1}{\hbar}\int p\,dx - \frac{\pi}{4}\right)dx = 1 = \frac{|c|^2}{2}\int_a^b\frac{dx}{p}$ ⊜

$\cos^2$ быстро осциллирует, т.к. уровни высокие, заменим $1/2$

⊜ $\frac{|c|^2}{2m}\int_a^b\frac{dx}{v} = \frac{|c|^2}{2m}\frac{T}{2} = \frac{|c|^2}{2m}\frac{\pi}{\omega} \Rightarrow c = \sqrt{\frac{2m\omega_{кл}}{\pi}}$ $\omega_{кл}$ — классич. частота

Интеграл относится к какому-то уровню энергии, поэтому на самом деле $c = c(E_n)$; $\omega_{кл} = \omega_{кл}(E)$

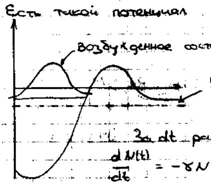
$\Psi_I = \frac{-2ci}{\sqrt{p}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^a p\,dx - \frac{\pi}{4}\right)e^{\frac{1}{\hbar}\int_a^b|p|dx}$

Положим $j_{пад} = 1 \Rightarrow c = ie^{i\frac{\pi}{4}}\sqrt{m}\,e^{-\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\,dx}$

$\frac{j_{прош}}{j_{пад}} = \frac{|c|^2}{m j_{пад}} = D \sim e^{-\frac{2}{\hbar}\int_a^b|p|dx}$

Квазистационарные состояния. α-распад.

Есть такой потенциал



$\frac{e^2(z-2)}{r}$

Кюри измерил такую функцию:

За dt распалось $dN(t)$ ядер. $dN \sim N(t)dt$, $N(t)$ — число ядер.

$\frac{dN(t)}{dt} = -\gamma N(t) \Rightarrow N(t) = N(0)e^{-\gamma t}$

$\frac{N(t)}{N(0)} = e^{-\gamma t}$ число не распавшихся ядер к моменту времени t убывает экспоненциально, это экспериментальный факт

$\gamma = \frac{1}{\tau}$, τ — период полураспада. Γ — величина с размерностью энергии

$\gamma = \frac{1}{\tau} = \frac{\Gamma}{\hbar}$ Γ — ширина линии (пока так ее назовем)

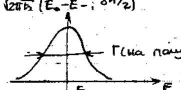
Частицы вылетают с заданной энергией E_0 и заданным временем жизни

$\Psi(t) \sim e^{-i\frac{E_0 t}{\hbar} - \frac{\gamma t}{2}}$ ↳ т.к. $|\Psi|^2$ должна следовать закону $e^{-\gamma t}$

$\Psi(E) = \int_0^\infty \frac{e^{iEt/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\Psi(t)dt = \frac{-i\hbar}{\sqrt{2\pi\hbar}(E_0 - E - i\gamma\hbar/2)}$

$\int|\Psi(E)|^2dE = 1$ — сделаем так

$|\Psi(E)|^2 = \frac{1}{\pi}\frac{\Gamma/2}{(E_0-E)^2 + \Gamma^2/4}$



Разброс по энергиям $\Delta E \gtrsim \Gamma \sim \frac{\hbar}{\tau} \Rightarrow \Delta E\cdot\tau \gtrsim \hbar$

$E_0 = 1$ МэВ

$\tau \gtrsim 1c$ $\Gamma \lesssim 10^{-15}$ эВ — пик очень узкий.

E_n Γ_n — ?

$E_n \to \int_b^a p\,dx = \pi\hbar(n + 3/4)$ (считаем, что барьер высокий)

$\Gamma_n = \frac{\hbar}{\tau} = \hbar\nu w = \hbar\nu(E_n)D(E_n) = \hbar\frac{\omega_{кл}(E)}{2\pi}D(E_n)$

↳ вероятность распада в единицу времени

При размере ямы a $\nu(E_n) = \frac{v(E)}{2a}$

Задача не стационарная: вероятность обнаружить частицу в яме нарастает как $e^{-\gamma t}$

$\Psi(t) \sim e^{-i\frac{E_n t}{\hbar} - \frac{\Gamma_n t}{2\hbar}} \sim$

$\sim e^{-i\tilde{E}_n t/\hbar}$ $\tilde{E}_n = E_n - i\frac{\Gamma_n}{2}$

↳ complex энергия.

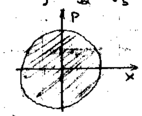
правило соответствия (с классикой)

3) $\frac{dE_n}{dn} = E_{n+1} - E_n = \hbar\omega_{кл}(E_n)$ (частота излучения частицы в классике равна разности энергий)

$E_{n+\Delta n} - E_n = \frac{dE_n}{dn}\Delta n$ — при больших n в классике (квазиклассике) уровни в каком-то месте эквидистантны с классической частотой колебаний.

4) $\frac{1}{2\pi\hbar}\oint p\,dx = \frac{S}{2\pi\hbar}$ S — площадь в фазовом пространстве

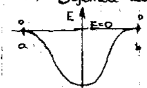
$\oint = \int_a^b + \int_b^a$



Если $2\pi\hbar$ обозвать элементарной ячейкой, т.е. мерить площадь в единицах $2\pi\hbar$, то $\frac{1}{2\pi\hbar}\oint p\,dx = \frac{S}{2\pi\hbar} = n$

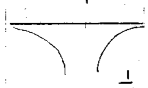
Число состояний в элементе $\Delta p\Delta x$: $n = \frac{\Delta p\Delta x}{2\pi\hbar}$

5) Оценка количества уровней в яме



a, b — концы потенциала

$\frac{1}{\pi\hbar}\int_a^b p|_{E=0}dx = \frac{1}{\pi\hbar}\int_a^b\sqrt{2m(-U(x))}dx = N$ — число уровней в яме



Если потенциал лежит в конечных пределах и не сингулярен, то N — конечное число.

— Но бывает и так

Пусть $U(x) = -\alpha|x|^\nu|_{x\to\infty}$, $-2 < \nu < 0$

$\frac{1}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}p|_{E=0}dx = \frac{1}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\sqrt{2m(-U(x))}dx$ — при таких ν $N = \infty$, т.е. уровни сгущаются около $E = 0$

$E_n \sim n^{\frac{2\nu}{2+\nu}}|_{n\to\infty} \to 0$

$\nu = -1$ (кулон) $E_n \sim -\frac{1}{n^2}$

$\nu < -2$ — интеграл конечен. Т.е. в таких полях число уровней конечно.

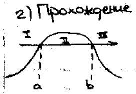
Возьмем $U(x) \sim \frac{1}{x^4}$ (пример — отрицательный ион водорода)

H^- $U \sim -(\vec{d}\vec{E}) \sim E^2 \sim \frac{1}{r^4}$ дипольный момент ~ полю (наведенный)

дип. момент — поле

$\Rightarrow$ уровней конечное число, экспери. установлено, что один

2) Прохождение через барьер



$D = \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_a^b|p|dx\right]$ — докажем это

↳ коэфф. прохождения

$\Psi_{III} = \frac{c}{\sqrt{p}}e^{\frac{i}{\hbar}\left(\int_b^x p\,dx - \frac{\pi}{4}\right)}$ — смотрим прошедшую волну:

Сшиваем: $\Psi_{II} = \frac{c}{\sqrt{|p|}}\left(-ie^{\frac{1}{\hbar}\int_x^b|p|dx} + \underbrace{\frac{1}{2}e^{-1/\hbar\int_x^b p\,dx}}\right)$ пренебрежем (если не пренебрегать, то будет еще и так)

$\int_x^b = \int_a^b - \int_a^x$ продолжается в cos

t и x в уравнении шр. разделятся, если E — complex

$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla + U(r)\right)\Psi(r) = \tilde{E}\Psi(r)$

$\Psi(r)|_{r\to\infty} \sim e^{-ikr}$

Лекция 12.

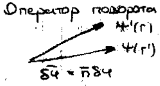
1) Момент импульса. Повороты. Коммутационные соотношения (геометр. интерпретация)
2) Собственные значения и собственные функции момента
3) Четность состояний с определенным моментом.

Классика $M = r\times p$

Сопоставим этой радости оператор $\hat{M} = -i\hbar\,\vec{r}\times\nabla = \hbar\vec{L} = \varepsilon_{ijk}r_j p_k = M_i$ ↳ тензорный вид

Оператор поворота $\hat{R}^{\vec{n}}_{\delta\varphi}\Psi(r) = \Psi'(r) = \Psi(r - \delta\vec{r}) = \Psi(r - [\delta\vec{\varphi}\times\vec{r}]) =$

$= \Psi(r) - [\delta\vec{\varphi}\times\vec{r}]\nabla\Psi(r) + \ldots = (1 - \delta\vec{\varphi}[\vec{r}\nabla])\Psi(r) = (1 - \frac{i}{\hbar}\delta\vec{\varphi}\cdot\hat{\vec{M}})\Psi(r)$



$\delta\vec{\varphi} = \vec{n}\delta\varphi$ Конечный поворот $R^n_\varphi = e^{-i/\hbar\,\varphi\hat{M}}$

Если $\hat{H}$ не зависит от углов (т.е. поле центрально симметрично) $\Rightarrow$ $\hat{H}$ не меняется при поворотах. Т.к. R^n_φ — унитарный, $R^{n-1}_\varphi = R^{n+}_\varphi$

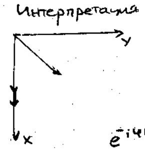
$R^n_\varphi\hat{H}R^{n+}_\varphi = \hat{H} \to [\hat{M}\hat{H}] = 0$!! $\Rightarrow$ M — сохраняется, т.е. $\frac{d}{dt}\langle M\rangle = 0$

$[M_i p_j] = [\varepsilon_{ilk}r_l p_k, p_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}p_k$

$[M_i r_j] = [\varepsilon_{ilk}r_l p_k, r_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}r_k$

$[M_i, M_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}M_k$

Интерпретация $R^z_{\delta\varphi}T\delta_{ax} - T\delta_{ax}R^z_{\delta\varphi} = T\delta_{ay} = \delta\varphi\delta_{ax} - T(\varphi)$



$[M_i, r^2] = [M_i, r_j r_j] = [M_i r_j]r_j + r_j[M_i r_j] = 0$

$[M_i, P^2] = 0$ — аналогично.

$[M_i, M^2] = 0$

$e^{i\varphi L_z}\hat{x}e^{-i\varphi L_z} = x\cos\varphi + y\sin\varphi$

$= x - \frac{i}{1!}\varphi[L_z x] + \frac{(-i)^2}{2!}\varphi^2[L_z[L_z x]] + \ldots$

Здесь L — это момент, поделенный на $\hbar$, $L = M/\hbar$

$[\hat{L}^2, L_i] = 0$ — могут быть общие собственные функции

$[L_i, L_j] = i\varepsilon_{ijk}L_k$ — у L^2 и у какой-то компоненты L (часто берут L_z)

Введем операторы: $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$ (повышающий и понижающий)

$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = L_-L_+ + \hat{L}_z^2 + \hat{L}_z = L_+L_- + L_z^2 - L_z = \frac{1}{2}(L_+L_- + L_-L_+) + L_z^2$

$[L^2, L_\pm] = 0$

$$\boxed{[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = \pm L_\pm \qquad [L_+L_-] = 2L_z}$$

$z = r\cos\theta$

$L_z = -i\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}$

$L_\pm = e^{\pm i\varphi}\left[\frac{\partial}{\partial\theta} \pm i\,ctg\,\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]$

$L^2 = -\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$

$\hat H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(|\vec r|)$

$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\hat L^2}{r^2}$

$\hat L_z\Psi(\vec r) = \ell_z\Psi(\vec r)$, где $\Psi(\vec r)$ – собственная функция $\hat H$, $\Psi(\vec r) = R(r)\Theta(\theta)\varphi(\varphi)$

$-i\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi(r) = \ell_z\Psi(r) \Rightarrow \Psi(r) = \Psi(|r|,\theta)e^{i\ell_z\varphi}$

Из однозначности: $\ell_z = m = 0, \pm1, \pm2, \ldots$

Найдем собственные функции и значения оператора $\hat L^2$ исходя только из коммутационных соотношений (не используя его явный вид)

$[L_i L_j] = i\varepsilon_{ijk}L_k \quad [L^2 L_z] = 0$ Теперь как бы для размышлений мы взяли коммутационные соотношения, забыв про явный вид моменты.

$\hat L^2 = L_-L_+ + L_z^2 + L_z = L_+L_- + L_z^2 - L_z = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$

$\hat L^2\Psi_{\lambda m} = \lambda\Psi_{\lambda m}$

$\hat L_z\Psi_{\lambda m} = m\Psi_{\lambda m}$, m – пока что только обозначение

Заметим, что $\langle\Psi_{\lambda m}|\hat L^2 - \hat L_z^2|\Psi_{\lambda m}\rangle = \lambda - m^2 = \langle\Psi_{\lambda m}|L_x^2 + L_y^2|\Psi_{\lambda m}\rangle \geq 0 \Rightarrow$ операторы эрмитовы, поэтому их среднее ≥ 0

$\Rightarrow \sqrt\lambda \geq |m|$

$\hat L^2\hat L_\pm\Psi_{\lambda m} = \lambda\hat L_\pm\Psi_{\lambda m} \Rightarrow$ функция $L_\pm\Psi_{\lambda m}$ тоже собственная функция как и $\Psi_{\lambda m}$ и при этом с теми же значениями

коммут. операторы коммутируют

$\hat L_z\hat L_\pm\Psi_{\lambda m} = (\hat L_\pm\hat L_z \pm \hat L_\pm)\Psi_{\lambda m} = (m\pm1)L_\pm\Psi_{\lambda m}$ – т.о. L_+ – повышающий, L_- – понижающий, отн. L_z

$[\hat L_z\hat L_\pm] = \pm\hat L_\pm$

Обозначим $m_{max} = \mathcal{L}$, $m_{min} = \mathcal{L}'$ (из ограниченности $\sqrt\lambda \geq |m|$) $\Rightarrow$

$\Rightarrow \begin{cases} L_+\Psi_{\lambda m_{max}} = 0 \\ L_-\Psi_{\lambda m_{min}} = 0\end{cases}$

$\lambda = \langle\Psi_{\lambda m}|\hat L^2|\Psi_{\lambda m}\rangle = \langle L_-L_+ + L_z^2 + L_z\rangle\big|_{m=m_{max}} = \mathcal{L}(\mathcal{L}+1)$

$\lambda = \langle\Psi_{\lambda m}|\hat L^2|\Psi_{\lambda m}\rangle = \langle L_+L_- + L_z^2 - L_z\rangle\big|_{m=m_{min}} = \mathcal{L}'^2 - \mathcal{L}' = \mathcal{L}'(\mathcal{L}'-1)$

Отсюда: $\mathcal{L}' = -\mathcal{L}$ или $\cancel{\mathcal{L}' = \mathcal{L}+1}$, т.к. $\mathcal{L}'$ – min, а $\mathcal{L}$ – max

Проекция момента m может принимать значения $m = \mathcal{L}; \mathcal{L}-1; \mathcal{L}-2; \ldots; -\mathcal{L}$

Возможно $2\mathcal{L}+1$ значение m, соответствующие одному λ

Спектр вырожден по проекции момента

$L_\pm\Psi_{\ell m} = \underbrace{C^\pm_{\ell m}}_{\text{множ}}\Psi_{\ell m\pm1}$ Состояние характеризуется модулем L и проекцией m

$\langle m+1|L_+|m\rangle$ – ? $\quad \ell = m_{max} = \mathcal{L}$

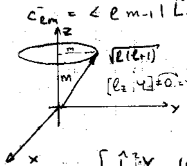
$\langle\ell m|L_-L_+|\ell m\rangle = |C^+_{\ell m}|^2\langle\ell m+1|\ell m+1\rangle = \langle\ell, m|\hat L^2 - L_z^2 - L_z|\ell m\rangle =$

$= |C^+_{\ell m}|^2 = \ell(\ell+1) - m^2 - m = \ell(\ell+1) - m(m+1) =$

$= (\ell-m)(\ell+m+1)$

$C^+_{\ell m} = \langle\ell m+1|\hat L_+|\ell m\rangle = \sqrt{(\ell-m)(\ell+m+1)}$

$C^-_{\ell m} = \langle\ell m-1|\hat L_-|\ell m\rangle = \sqrt{(\ell+m)(\ell-m+1)}$ – аналогично.



модель прецессии

$\langle\ell m|L_x|\ell m\rangle = 0 = \frac{1}{i}\langle\ell m|[L_yL_z]|\ell m\rangle$

$[\ell_z, \varphi] \neq 0 \to i$

$\hat L_x^2 = \frac{1}{2}\left(\ell(\ell+1) - m^2\right)$

Найдем явный вид волновых функций $\hat L^2$, $\hat L_z$

$\begin{cases} \hat L^2 Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = \ell(\ell+1)Y_{\ell m} \\ \hat L_z Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = mY_{\ell m}(\theta,\varphi)\end{cases}$ – собственные функции $\hat L^2$

Однозначные, конечные при $\theta = 0, \pi$ получаются только если $L\in\mathbb{Z}$ $L \geq |m|$

$Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = \Theta_{\ell m}(\theta)\Phi_m(\varphi)$; $\Phi_m(\varphi) = e^{im\varphi}/\sqrt{2\pi}$

$\Theta_{\ell m} = (\mp1)^{\frac{m+|m|}{2}}\sqrt{\frac{2\ell+1}{2}}\sqrt{\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}}P_\ell^{|m|}(\cos\theta)$ – присоединенный многочлен Лежандра

$\int Y_{\ell m}(\theta,\varphi)Y^*_{\ell'm'}(\theta,\varphi) = \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}$

$P_\ell^m(z) = (1-z^2)^{\frac{|m|}{2}}\frac{d^{|m|}}{dz^{|m|}}P_\ell(z)$

$P_\ell(z) = \frac{1}{2^\ell\ell!}\frac{d^\ell}{dz^\ell}(z^2-1)^\ell$

$P_0 = 1$, $P_1(z) = z$ $\quad P_2 = \frac{1}{2}(3z^2-1) + \ldots$

Лекция 13 $\qquad$ 25.11.02

1. Разделение переменных в ц.-с. поле. Радиальные В.Ф. Граничное условие при $r\to0$
2. Свободное движение. Сферические волны. Фазы рассеяния.

Л.Л. §§ 18, 32, 33 (задачи!)
С.Х. § 15
Зеленинский ч. I лекц. 8

Четность волновой функции с определенным ℓ.

$\hat\ell_\pm = e^{\pm i\varphi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\,ctg\,\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$

$\hat\ell_+ Y_{\ell\ell}(\theta,\varphi) = 0$

$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial\theta}\Theta_{\ell\ell}(\theta) - \ell\,ctg\,\theta\;\Theta_{\ell\ell}(\theta) = 0$

$\Theta_{\ell\ell} \sim \sin\theta$ – очевидно, т.о. решение $\sin^\ell\theta$

$Y_{\ell\ell}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{4\pi}}\frac{(-1)^\ell}{2^\ell\ell!}\sin^\ell\theta\,e^{i\ell\varphi}$ – все остальное нормировка

$Y_{\ell m} \Rightarrow$ все остальные ф-и будут получаться действием понижающего оператора $(\hat\ell_-)^{\ell-m}Y_{\ell m}$;

Если речь идет о ц.с. поле, то гамильтониан коммутирует с оператором четн.

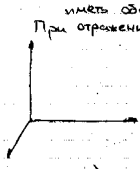
$[\hat{\mathbb{P}}, \hat H] = 0 \quad \vec r\to-\vec r$

Заметим, что $[\hat{\mathbb{P}}, \hat\ell_i] = 0$

Т.о. заключаем, что если в ц.с. поле заданы $\hat H$, $\hat\ell^2$, $\hat\ell_z$, $\hat{\mathbb{P}}$ они могут иметь общие собств. функции.

При отражении:

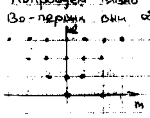
$r\to r$
$\theta\to\pi-\theta$
$\varphi\to\varphi+\pi$



Из явного вида $\hat\ell_\pm$ видно, что они не меняют знак

$Y_{\ell m}(\pi-\theta, \varphi+\pi) = \hat{\mathbb{P}}Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = (-1)^\ell Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$, т.е. это собств. функции опер-ра четности.

Попробуем явно представить себе некоторые волновые функции.
Во-первых они образуют мультиплет



Для $\ell=0$ – одно состояние, для $\ell=1$ – три состояния, $\ell=2$ – 5 сост.

$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$

$Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\,e^{-i\varphi}$, $\quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \quad Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\,e^{+i\varphi}$

Возьмем единичный вектор $\vec n = \frac{\vec r}{|r|}$

$Y_{1\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}(n_x \pm in_y) \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}n_z$

Из этого вида видно, что четность этих сост. совпадает с четностью $(-1)^\ell$

$Y_{2m} \sim n_in_j$ – симметричный бесследовый тензор

Хочет обратить наше внимание на следующую задачу:

Пусть есть состояние $Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$, выделенная ось z.
С какой вероятностью в этом состоянии представлены состояния в проекции на другую, наклоненную ось z'

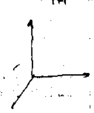
$Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = R_\alpha^{+\vec n}Y_{\ell m}(\theta',\varphi') = \sum_{m'=-\ell}^{\ell}Y_{\ell m}(\theta',\varphi')D^\ell_{m'm}$ – разложение в новой системе

углы отсчитываются уже от повернутой оси.

$|D^\ell_{m'm}|^2$ – вероятность (т.е. ответ на задачу)

$Y_{11}(\theta,\varphi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}(n_x + in_y)$

$Y_{1\pm1}(\theta',\varphi') = \mp\sqrt{}(n'_x \pm in'_y)$



$n'_x = n_x \quad n_y = n'_y\cos\alpha - n'_z\sin\alpha$
$\qquad\qquad n_z = n'_z\cos\alpha + n'_y\sin\alpha$

$|D_{10}|^2 = \frac{1}{2}\sin^2\alpha$

$|D_{11}|^2 = \cos^4\alpha/2$

$|D_{1-1}|^2 = \sin^4\alpha/2$

Вернемся немного назад: был задан вопрос $[\ell_z\,\varphi] = -i$ – каким образом согласуется с соотношением неопределенности.

Ответ (искать у Давыдова). $\frac{(\Delta\ell_z)^2(\Delta\varphi)^2}{(1-2\pi|\Psi(\pi)|^2)^2 \leftarrow \left(1-\frac{3}{\pi^2}(\Delta\varphi)^2\right)^2} \geq \frac{1}{4}$

ℓ_z эрмитов только на классе периодических функций.

Едем дальше! Итак центрально-симметричное поле.

Гамильтониан $\hat H = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r)\right) = \frac{\hat P_r^2}{2m} + \frac{\hbar^2\hat\ell^2}{2mr^2} + U(r)$

Радиальная часть оператора Лапласа может быть записана по разному:

$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r = \boxed{\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}} = \left(\frac{\hat P_r}{\hbar}\right)^2 = \frac{-1}{\hbar^2}\left(-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)\right)^2$

Ищем Ψ_r в виде $\Psi(\vec r) = R(r)Y(\theta,\varphi)$

$\frac{2m}{\hbar^2}\frac{r^2}{R(r)}\left[\frac{\hat P_r^2}{2m} + U(r) - E\right]R(r) = -\frac{1}{Y(\theta,\varphi)}\hat\ell^2Y(\theta,\varphi) = -\lambda$ – т.к. по разные стороны ф-и 2-х разных аргументов.

Разбили на 2 уравнения

$\begin{cases}\hat\ell^2Y(\theta,\varphi) = \lambda Y(\theta,\varphi) \\ \left(\frac{\hat P_r^2}{2m} + U(r) + \frac{\hbar^2\lambda}{2mr^2} - E\right)R(r) = 0\end{cases}$

Первое уравнение эквивалентно еще двум: $\quad \lambda = \ell(\ell+1)$

$\begin{cases}\left(\nabla_\theta^2 - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta(\theta) = -\lambda\Theta(\theta) \\ \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\Phi(\varphi) = -m^2\Phi(\varphi)\end{cases}$ $\quad \boxed{\begin{matrix}\ell = 0, 1, 2\ldots \\ \ell \geq |m| \quad m = -\ell, -\ell+1, \ldots, +\ell\end{matrix}}$

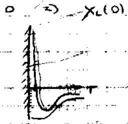
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2}+\underbrace{u(r)+\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2}}_{u_{эфф}(r)}\right]\chi_\ell(r)=E_\ell\chi_\ell(r) \quad (*)$$

Такая замена не безобидна, выставляем граничные условия на ф-и при $r\to 0$

Если $u(r)|_{r\to 0}\to const$ or $r^2u(r)|_{r\to 0}\to 0$

$R_\ell(r)$ - конечна при $r\to 0$ $\Rightarrow$ $\chi_\ell(0)=0$

Т.е. получается что-то такое



n_r - радиальное квантовое число $E_{n_r\ell}$, $n_r=0,1,2..$

$n_r=2$ 2
$n_r=1$ 1
$n_r=0$ $n_r=0$
$\ell=0$ $\ell=1$

При $\ell\neq 0$ $Y_{\ell m}$ имеет нули, $\Rightarrow$ по осцил. теореме это не основные состояния,

$\ell=0,1,2,3...$ принята система обозначений

$\ell=0$ s
$\ell=1$ p
$\ell=2$ d
$\ell=3$ f ...

Поведение в.ф. при $r\to 0$ в потенциале, удовл. условию $r^2u(r)|_{r=0}\to 0$

Выкидываем лишнее из $(*)$, получим

$$-r^2\frac{d^2}{dr^2}\chi_\ell(r)+\ell(\ell+1)\chi_\ell(r)=0$$

$\chi_\ell(r)=const\, r^s$ $\quad s(s-1)=\ell(\ell+1)$

ищем в таком виде

$s=-\ell \to \chi\sim 1/r^\ell \quad R\sim 1/r^{\ell+1}$ - плохой

$s=\ell+1 \to \chi\sim r^{\ell+1} \quad R\sim r^\ell$ - хороший

Условие нормировки $\int|R(r)|^2r^2dr=\int|\chi|^2dr=1$ забраковывает $\ell\geq 1$.

Но, $\ell=0$ усл. нормировки не выбраковывается. Попробуем воспользоваться условием эрмитовости:

$$\int_0^\infty \chi_b^*\left(-i\hbar\frac{d}{dr}\right)\chi_a\,dr=\int_0^\infty\left(-i\hbar\frac{d}{dr}\chi_b\right)^*\chi_a+\chi_b^*\chi_a\Big|_0^\infty$$

Для эрмитовости необходимо, чтобы χ_a,χ_b при $r=0$ $=0$, итак решение $1/r$ около нуля можно тоже загубить.

Получим асимптотики $\chi(p)$ из ВКБ.

ВКБ - вороной коньмы дрен

$$\chi(p)\sim\frac{1}{|p_r|}e^{\pm\int^r|p_r|dr}\sim\sqrt{r}\,e^{\pm(\ln r/r_0)\sqrt{\ell(\ell+1)}}$$

$$p_r=\sqrt{2m\left(E-u(r)-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right)}$$

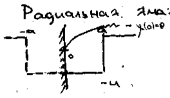
Сшивать с функцией Эйри надо вдалеке от точки поворота, а у нас окрестность сшивки содержит 0, а в 0 потенциал сингулярен. Т.е. надо иметь более точное решение, которое описывает поведение в 0.

Некая поправка:

$$\frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2}\to\frac{\hbar^2}{2m}\frac{(\ell+1/2)^2}{r^2}$$ - после такой замены получаются правильные волновые функции при $r\to 0$

Условие применимости ВКБ к радиальным задачам $n_r\gg 1$. ℓ не ограничен.
Условие применимости просто выбрано так, чтобы $n_r\gg 1$. На самом деле нужно устремить либо n_r, либо ℓ.

Радиальная яма:



Тезис: В 3D яме уровень есть не всегда:
Дорисовываем до одномерной ямы. там уровень есть всегда, но он I и нам не подходит из гран. условий.
А подходит нам II уровень

$$k\,ctg\,ka=-\varkappa$$

$$k=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E+u_0)}\qquad \varkappa=-\sqrt{\frac{2m}{\hbar}(-E)}\qquad(-u_0<E<0)$$

$ka=\frac{\pi}{2}\qquad u_{0\,min}=\frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}$ итого ~~нет~~ в 3D яме уровень есть не всегда

Для того, чтобы в 3D яме был уровень, надо, чтобы

$$u_0>E_{хар}\sim\frac{\hbar^2}{2ma^2}\sim\frac{p^2}{2m}$$

т.е. кинетическая энергия частицы в яме $\sim\frac{\hbar^2}{2ma^2}$, и она не вылетит только если $u_0>\frac{\hbar^2}{2ma^2}$

Переходим к следующему пункту:

Свободное движение.

Лекция 14

① Свободное движение. Сферические волны. Фазы рассеяния.
② Атом водорода. Собственные функции. Спектр кулоновское вырождение. Ψ_{100}, Ψ_{21m}
Л.Л. §§ 36(+задачи), 37
+ сх. §16.

$$\hat H=\frac{\hat p^2}{2m}$$ - решение ур-я Шредингера.

Функция с определенным импульсом $\Psi_{\vec p}(\vec r)=const\,e^{i\vec p\vec r/\hbar}$

p_x,p_y,p_z - полный набор квантовых чисел, Спектр ∞ кратно вырожден $\Rightarrow$
$\Rightarrow$ видимо $\exists$ другие операторы, некоммутирующие с p_x,p_y,p_z, но коммут. с $\hat H$. Этим другим набором может быть E,ℓ,m

$$\Psi_{k\ell m}=R_{k\ell}(r)Y_{\ell,m}(\Theta,\varphi)\qquad k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$Y_{\ell,m}(\Theta,\varphi)$ - универсальны для всех центр. симм. полей

Уравнение на радиальную функцию:

$$R''_{k\ell}+\frac{2}{r}R'_{k\ell}+\left[k^2-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right]R_{k\ell}=0$$ - потенциала нет, т.е свободное дв.

Попробуем решить: для этого примем $\ell=0$

$$\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rR_{k0})+k^2(rR_{k0})=0\qquad R_{k0}=\frac{\chi_{k0}}{r}$$

$$R_{k0}=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{\sin kr}{r}$$

Нормировка получена следующим образом: $\int_0^\infty r^2R_{k0}R_{k'0}dr=\int_0^\infty\chi_{k0}\chi_{k'0}dr=\delta(k-k')$

т.о. решили уравнение при $\ell=0$.
Теперь продуем при $\ell\geq 1$

$$R_{k\ell}=(-1)^\ell\frac{d^\ell}{d(kr)^\ell}R_{k0}(r)=\left\langle\begin{matrix}\text{оказывается, что эти}\\ \text{функции наз-ся сферическими}\\ \text{функциями Бесселя}\end{matrix}\right\rangle=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\,k\,j_\ell(kr)=\sqrt{\frac{k}{r}}J_{\ell+1/2}(kr)$$

$$j_0=\frac{\sin kr}{kr}\qquad j_1(x)=\frac{\sin x}{x^2}-\frac{\cos x}{x}$$

Рассмотрим асимптотики:

$$R_{k\ell}(r)\Rightarrow\begin{cases}A\ \ r\to 0 & \sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{1}{r}\frac{(kr)^{\ell+1}}{(2\ell+1)!!}\\ B\ \ r\to\infty & \sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{\sin(kr-\frac{\pi}{2}\ell)}{r}\end{cases}$$

Теперь мы все знаем про свободное движение. Теперь обобщаем результат:

Если $u(r)$ такой, что $r^2u(r)\xrightarrow[r\to 0]{}0$, то асимптотика при $r\to 0$, такая, что и в свободном движении

$$\chi''_{k\ell}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-u(r)-\frac{\hbar\ell(\ell+1)}{2mr^2}\right]\chi_{k\ell}=0\qquad R_{k\ell}=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{\sin\left(kr-\frac{\pi\ell}{2}+\delta_\ell(k)\right)}{r}$$

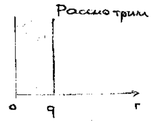
Подставим χ в виде $\chi\sim fe^{ikr}$. Подставим, получим:

$$f''+2ikf'-\left(u(r)+\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{2m}{\hbar^2}f=0\qquad f''\ll 2ikf'$$

$$2ik\ln f=\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^r\left(u(r)+\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\frac{\hbar^2}{2m}\right)dr$$

$u(r)|_{r\to\infty}$ - быстрее $\frac{1}{r}$

Рассмотрим рассеяние на абсолютно твердом шаре.



$$\chi_{k0}|_{r=a}=0$$

$$\delta_\ell=-ka$$

$$e^{ikz}=e^{ikr\cos\Theta}=\sqrt{\frac{\pi}{2}}\sum_{\ell=0}^\infty i^\ell(2\ell+1)\frac{1}{\sqrt{kr}}J_{\ell+1/2}(kr)P_\ell(\cos\Theta)$$

плоская волна, движущаяся по оси z

т.е. в.ф. с опр. импульсом можно разложить по функциям с определенным моментом, проекцией и энергией.

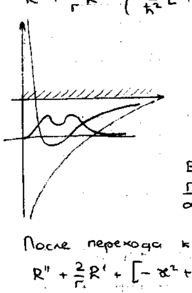
② Кулоновская задача.

Итак, есть электрон в поле $u(r)=-\frac{ze^2}{r}$ H, He^+, Li^{++}
Примем $z=1$, потом припишем к ответу в той же степени, что и e^2

Ищем решение в виде $R(r)Y_{\ell m}(\Theta,\varphi)$..

$$R''+\frac{2}{r}R'+\left(\frac{2m}{\hbar^2}E+\frac{2me^2}{\hbar^2r}-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right)R=0$$, попробуем получить R в виде $R_{n_r,\ell}(r)$

радиальное квантовое число.



Исходя из асимптотик, ищем $R=r^\ell e^{-\varkappa r}\varkappa(r)$

Характерная длина в атоме водорода - $a_Б=\frac{\hbar^2}{me^2}$

Характерная энергия - 13,6 эв $=1R_y=\frac{me^4}{2\hbar^2}=\frac{e^2}{2a_Б}$

Вводим безразмерные величины

$$\frac{r}{a_Б}\to r\qquad\frac{E}{1R_y}=-\varkappa^2$$

После перехода к новым переменным получаем следующее уравнение

$$R''+\frac{2}{r}R'+\left[-\varkappa^2+\frac{2}{r}-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right]R=0$$

$$rf''+2(\ell+1-\varkappa r)f'+2(1-\varkappa-\varkappa\ell)f=0,\quad f=\sum_{k=0}^\infty a_kr^k$$

$$\sum_{k=0}^\infty a_k\left\{r^{k-1}[k(k-1)+(2\ell+2)k]-2r^k[\varkappa(k+\ell+1)-1]\right\}=0$$

$$k\to k+0,\ \text{тогда}\ \sum_{k=0}^\infty\to\sum_{k=-1}^\infty=\sum_{k=0}^\infty$$

$$a_{k+1}=2\frac{\varkappa(k+\ell+1)-1}{(k+1)(k+2\ell+2)}a_k$$

$$\varkappa\quad k\to\infty\qquad\frac{2\varkappa}{k}=\frac{a_{k+1}}{a_k}\qquad\frac{(2\varkappa r)^k}{k!}\qquad r\to\infty,\ f\to e^{2\varkappa r}$$

$\Rightarrow$ конечное при $r\to 0$ решение плохо себя ведет на ∞.
Попытаемся оборвать ряд, положив $\varkappa_{n_r\ell}=\frac{1}{n_r+\ell+1}$, т.е. обрываем ряд на $k=n_r$
$n_r=0,1,2.$

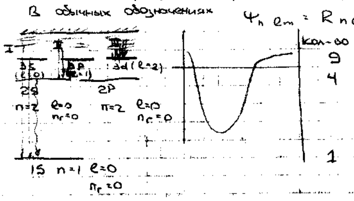
$$\Psi_{n_r\ell m}=R_{n_r\ell}(r)Y_{\ell m}(\Theta,\varphi)$$

$$E_{n_r\ell}=-\frac{me^2}{2\hbar^2(n_r+\ell+1)^2}$$, заметим, что энергия зависит от n_r и ℓ не по отдельности, а от их комбинации.

т.е. одной энергии могут соответствовать разные n_r, l ... случайным вырождением в атоме водорода.

Давайте нарисуем спектр атома водорода:

В обычных обозначениях $\psi_{nlm} = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta,\varphi) = \left(\frac{r}{a_Б}\right)^l e^{-\frac{r}{a_Б n}} L_n^l\left(\frac{r}{a_Б}\right) Y_{lm}(\theta,\varphi) C_n^l$



=> делаем заключение, что ~~на~~ спектр вырожден n^2 раз.

По излучению при переходе на более низкий уровень различаются серии:

I – серия Лаймана

II – серия Бальмера, формула Бальмера: $\hbar\omega_{nn'} = Ry\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2}\right)$

III – серия Пашена

$$\psi_{\substack{100\\nlm}} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_Б^3}} e^{-r/a_Б} \qquad \psi_{200} = \frac{1}{2\sqrt{2\pi a_Б^3}}\left(1 - \frac{1}{2}\frac{r}{a_Б}\right) e^{-r/a_Б 2}$$

$$\psi_{21m} = \left(\frac{r}{a_Б}\right)\frac{1}{2\sqrt{6a_Б^3}} e^{-r/a_Б^2} \begin{cases} -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta\, e^{i\varphi} \\ \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta \\ \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta\, e^{-i\varphi} \end{cases}$$

Одно очень важное следствие вырождения спектра:

Для любых стационарных состояний,
но в любом центрально-симметричном поле (некулоновском)
среднее значение дипольного момента $= 0$

$\langle \vec{d} \rangle = \int \psi^*_{n_r, l m}\, e\vec{r}\, \psi_{n_r l m} d^3r = 0$

Докажем эту теорему: $\psi_{n_r l m}(-\vec{r}) = (-1)^l \psi_{m l n_r}(r)$

Состояния обладают определенной

2) Формула производной энергии по параметру

3) Теория возмущений в случае вырождения

Пусть известна система с Гамильтонианом H^0

$\hat{H}^0 \psi_n^{(0)} = E_n \psi^{(0)}$, эта система точно известна

Часто Гамильтониан исследуемой системы можно представить $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{V}$

(*) $\hat{H}\psi = (\hat{H}^0 + \hat{V})\psi = E\psi$ → решаем такую задачу

→ пусть возмущения таковы, что гран. условия задачи не меняются
[например на ∞ ψ как падало до 0, так и падает]

$\psi = \sum_m c_m \psi_m^{(0)}$ – разложим так и подставим в (*)

$$\sum_m \left(E_m^{(0)} c_m \psi_m^{(0)} + \hat{V} c_m \psi_m^{(0)}\right) = E\sum_m c_m \psi_m^{(0)} \;\Big|\; 1)\,\psi_k^{(0)} \quad 2) \int d^3r$$

$$E\sum_m c_m \delta_{mk} = \sum_m \Big(E_m^{(0)} c_m \delta_{mk} + c_m \underbrace{\int \psi_k^{*(0)} \hat{V} \psi_m^{(0)} d^3r}_{V_{km}}\Big)$$

В итоге получаем систему уравнений

$$(E - E_k^{(0)}) c_k = \sum_m V_{km} c_m \quad (A)$$

Никаких приближений не сделано => система эквивалентна (*)

Пусть надо найти поправку к n-му уровню невозмущенной задачи

$$E = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots \qquad E_n^{(1)} \sim V \qquad E_n^{(2)} \sim V^2$$
$$c_m = c_m^{(0)} + c_m^{(1)} + \dots \qquad c_m^{(1)} \sim V$$

Если $\hat{V} \to 0$, то $E \to E_n^{(0)}$ $\psi \to \psi_n^{(0)}$ | => $c_m^{(0)} = \delta_{mn}$

Ставим разложения в уравнения

$$(E_n^{(0)} - E_k^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots)(\delta_{kn} + c_k^{(1)} + c_k^{(2)} + \dots) = \sum_m V_{km}(\delta_{mn} + c_m^{(1)} + \dots)$$

Если V в каком-то смысле мало, то правая часть мала. Ну и левая тоже по крайней мере малая первого порядка по V.

Решаем в первом порядке:

$$E_n^{(1)} \delta_{kn} + (E_n^{(0)} - E_k^{(0)}) c_k^{(1)} = \sum_m V_{km} \delta_{mn} = V_{kn}$$

1) положим $k = n$ $\quad E_n^{(1)} = V_{nn}$

2) пусть $k \neq n$ $\quad c_k^{(1)} = \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$

Итак $E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} = E_n^{(0)} + V_{nn}$

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \sum_m{}' \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)} + c_n^{(1)} \psi_n^{(0)}$$

$\sum_m{}' \equiv \sum_{m \neq n}$

как быть с этим? (он не определен)

Ищем $c_n^{(1)}$ из условия нормировки

$\int |\psi_n|^2 d^3r = 1$ (в первом порядке)

$1 + 2\,\mathrm{Re}\, c_n^{(1)} \Rightarrow \mathrm{Re}\, c_n^{(1)} = 0$

стандартно: $c_n^{(1)} = 0$ (вот так) [в магнитном поле все хитрее)

квадрат суммы дает второй порядок и поэтому выкидываем

Найдем вторую поправку к энергии: собираем второй порядок,

$$E_n^{(2)} \delta_{kn} + E_n^{(1)} c_k^{(1)} + (E_n^{(0)} - E_k^{(0)}) c_k^{(2)} = \sum_m V_{km} c_m^{(1)}$$

1) $k = n$: $\quad E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} V_{nm} c_m^{(1)}$ – слагаемые $\sim c_k^{(1)}$ сократятся

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{V_{nm} V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \qquad \hat{V} \text{ – эрмитов, т.е. } V_{mn} = V_{nm}^*$$

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

Теперь $\quad E_n = E_n^{(0)} + V_{nn} + \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \sum_{m \neq n} \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)}$$ ← здесь вторую поправку не пишем.

Критерий теории возмущений:

$|V_{mn}| \ll |E_m^{(0)} - E_n^{(0)}|$

$|V_{nn}| \ll |E_{n\pm1}^{(0)} - E_n^{(0)}|$

В электрическом поле гран. условия меняются

$D \sim e^{-pa} \sim e^{-E_0/\mathcal{E}}$

Не разложить в ряд, т.е. не представить в виде

$D = D^0 + \underset{\sim\mathcal{E}}{D^1} + \underset{\sim\mathcal{E}^2}{D^2}$

!!! но если рассчитывать поправки на временах $t \ll \tau \sim \frac{1}{Dj_0}$ то можно решить

Это потому, что ряды теории возмущений иногда бывают асимптотическими

Пункт 2: (© Р. Рейман)

Пример: поправка к кулоновскому потенциалу $\frac{1}{r^2}$

$(H - E)\psi = 0 \;\Big|\; \frac{\partial}{\partial\lambda}$

Пусть $H(\lambda)$, λ – некий параметр

$$(\hat{H} - E)\frac{\partial\psi}{\partial\lambda} = -\left(\frac{\partial\hat{H}}{\partial\lambda} - \frac{\partial E}{\partial\lambda}\right)\psi \;\Big|\; \cdot\psi^*, \int$$

$$\int \psi^* (\hat{H} - E) \frac{\partial\psi}{\partial\lambda} d^3r = -\int \psi^* \left(\frac{\partial\hat{H}}{\partial\lambda} - \frac{\partial E}{\partial\lambda}\right)\psi\, d^3r$$

Из эрмитовости $\hat{H}$

$$\frac{\partial E}{\partial\lambda} = \int \psi^* \frac{\partial\hat{H}}{\partial\lambda} \psi\, d^3r = \left\langle \frac{\partial\hat{H}}{\partial\lambda} \right\rangle$$

Применим формулу к примеру.

$$H_r^{(0)} = \frac{p_r^2}{2m} - \frac{e^2}{r} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{L(L+1)}{r^2}$$

$V = \frac{\beta}{r^2}$, $\beta < 0$

$$E_n^{(0)} = \frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} = \frac{me^4}{2\hbar^2 (n_r + L + 1)^2}$$

$$\left.\frac{\partial E_n^{(0)}}{\partial L}\right|_{n_r\text{-фикс}} = \frac{me^4}{\hbar^2 n^3} = \langle nlm | \frac{\hbar^2 (l + 1/2)}{mr^2} | nlm \rangle$$

$$\langle nlm | \frac{1}{r^2} | nlm \rangle = \frac{m^2 e^4}{\hbar^4 e^3 (l + 1/2)}$$

Еще задача на возмущения:

рел. поправки к уровням атома водорода

В классике: $E = \sqrt{m^2c^2 + p^2c^4} \simeq mc^2 + \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2}$

Вырожденные уровни энергии.

$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \sum_{m \neq n} \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)}$ ← в случае вырождения не сработает, т.к. в знаменателе может появиться нуль.

Пусть номеру n соответствует S_n функций $\psi_n^{(0)}, \psi_{n'}^{(0)} \dots$ (для невозмущенной задачи)

Скомбинируем волновые функции так, чтобы привести V_{mn} к диагональному виду («правильный набор волн. функций»)

$c_n \psi_n^{(0)} + c_{n'} \psi_{n'}^{(0)} + \dots$ ← ставим в (A), полагая $k = n$.

Действуя в первом порядке

$E = E^{(0)} + E^{(1)}$

$E^{(1)} c_k = \sum_m V_{km} c_m$; $\quad c_n = c_n^{(0)}$, $c_{n'} = c_{n'}^{(0)} \dots$

т.е. $\neq 0$ коэфф. отвечающие уровню n $\quad c_m = c_m^{(0)} = 0 \quad m \neq n, n' \dots$

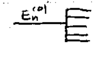
$k = m$

Итак: $E^{(1)} c_n^{(0)} = \sum_{n'} V_{nn'} c_{n'}^{(0)} \to \sum_{n' = 1,2..S_n} (V_{nn'} - E^{(1)} \delta_{nn'}) c_{n'}^{(0)} = 0$

=> Имеем нетривиальное решение, если $\det |V_{nn'} - E^{(1)}\delta_{nn'}| = 0$

Это условие дает n разных значений поправки $E^{(1)}$

Уровень $E_n^{(0)}$ расщепится на S_n разных подуровней $E_{n,k} = E_n^{(0)} + E_k^{(0)}$,



Пример: Двухуровневая задача

Секулярное уравнение (матрица эрмитова)

$$\begin{vmatrix} V_{11} - E^1 & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} - E^1 \end{vmatrix} = 0 \text{ . имеет корни:}$$

$E_1^2 - E_1(V_{11} + V_{22}) + |V_{12}|^2 + V_{11}V_{22} = 0$ =>

$$\Rightarrow E_{1,2}^{(1)} = \frac{1}{2}\left[(V_{11} + V_{22}) \pm \left[(V_{11} - V_{22})^2 + 4(V_{12})^2\right]^{1/2}\right]$$

Расщепление уровней $\Delta E = E_1^{(1)} - E_2^{(1)} = \sqrt{(V_{11} - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2}$

Нойдем волновые функции $\left[\begin{bmatrix} 0 & V_{12} \\ V_{21} & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \pm|V_{12}| & 0 \\ 0 & \pm|V_{12}| \end{bmatrix}\right] \cdot \begin{pmatrix} c_1^{(0)} \\ c_2^{(0)} \end{pmatrix}_\pm = 0$

$\Rightarrow \quad < \Psi = c_1^{(0)}\psi_1^{(0)} + c_2^{(0)}\psi_2^{(0)} >$

$\Rightarrow \quad c_2^{(0)} = \pm \dfrac{|V_{12}|}{V_{12}} c_1^{(0)} = \pm e^{-i\varphi} c_1^{(0)}$, $\quad V_{12} = |V_{12}| e^{i\varphi}$

$$\Psi_1 = \frac{\psi_1^{(0)} + e^{-i\varphi}\psi_2^{(0)}}{\sqrt{2}}$$

$$\Psi_2 = \frac{\psi_1^{(0)} - e^{-i\varphi}\psi_2^{(0)}}{\sqrt{2}}$$

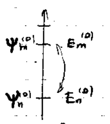
> правильные волновые функции.

Лекция. 16   16.12.02

Стационарная теория возмущений.

1. Случай двух близких уровней
2. Теорема о непересечении уровней
3. Поляризуемость атома водорода
4. Штарк эффект в водороде для $n=2$ (линейный !)
5. Природа сил Ван-дер-Ваальса

Л.Л. § 76, 79, 89   ГКК(81)   11.52–11.57, 11.72

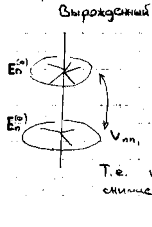


$$E_n = E_n^0 + V_{nn} + \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

$$\Psi_n = \psi_n^{(0)} + \sum_{m \neq n} \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)}$$

невырожденный случай

Вырожденный случай:



Правильные волновые функции

$\Psi_n = c_n^{(0)}\psi_n^{(0)} + c_{n'}\psi_{n'}^{(0)} + \dots$

$\sum_{n'} (V_{nn'} - E^{(1)}\delta_{nn'}) c_{n'}^{(0)} = 0$

$\det|V_{nn'} - E^{(1)}\delta_{nn'}| = 0 \qquad E_{nk} = E_n^{(0)} + E_k^{(1)}$

Т.е. каждый уровень расщепится на группу близких, иногда вырождение снимается полностью

Уровни с разными квантовыми числами могут пересекаться, с одинаковыми – как правило, нет

Пункт 3. Атом водорода помещен в однородное эл. поле.

19... Штарк открыл расщепление спектральных линий в электрическом поле.

$H^{(0)} = \dfrac{\bar{P}^2}{2m} - \dfrac{e^2}{r} \qquad E_n^{(0)} = -\dfrac{me^4}{2\hbar^2 n}$, n – главное квантовое число

$|n\ell m>$

$n = n_r + \ell + 1 \qquad \Psi_{n\ell m}(r,\theta,\varphi) = R_{n\ell}(r)\, Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$

$\hat{V} = -e\bar{r}\bar{\mathcal{E}} = -\bar{d}\bar{\mathcal{E}}$ – возмущение

$<n\ell m| -\bar{d}\bar{\mathcal{E}}|n,\ell,m> = 0 \Rightarrow$ поправки первого порядка нет.

ΔE_1 – поправка к первому уровню

$\underset{(n)}{\Delta E_1} = E_1^{(2)} = -\frac{1}{2}\alpha_{ij}^{(1)}\mathcal{E}_i\mathcal{E}_j \Leftrightarrow -\frac{1}{2}\alpha_{zz}\mathcal{E}^2$ ← направим поле по z

Возьмем производную от энергии по параметру (т. Феймана)

$-\dfrac{\partial \Delta E_1}{\partial \mathcal{E}_i} = \alpha_{ij}\mathcal{E}_j = \left\langle -\dfrac{\partial \hat{H}}{\partial \mathcal{E}_i} \right\rangle = <d_i^{(1)}> = \bar{d}_i^{(1)}$ → средний дипольный момент

α_{ij} – тензор поляризуемости

$\Rightarrow \alpha_{ij}$ действительно можно назвать поляризуемостью

α_{ij} должен обладать сферической симметрией. Единственный подходящий инвариантный тензор

$\alpha_{ij} = \delta_{ij}\alpha^{(1)}$

$$\alpha^{(1)} = -2\sum_{n \neq 1} \frac{|<n\ell m|d_z|100>|^2}{E_1^{(0)} - E_n^{(0)}}$$

Заметим, что эта величина имеет размерность объема см^3

Из соображений размерности эту сумму можно оценить, как $a_Б^3$ (?)

точный ответ $\quad \alpha^{(1)} = \frac{9}{2}a_Б^3 \sim 10^{-24}$ см^3

Оценим:

$\ell = 0$, $m = 0$, $d_z = er\cos\theta \sim Y_{10}$

$$\alpha^{(1)} = -2\sum_{m\, n\neq 1} \frac{|<n\ell m|d_z|100>|^2}{E_1^{(0)} - E_n^{(0)}}$$

Оценим снизу и сверху

$$-2\frac{|<210|d_z|100>|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} < \alpha^{(1)} < -\frac{2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} <100|d_z^2|100>$$

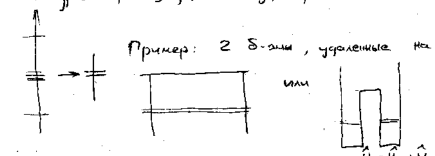
$$E_1^{(0)} - E_2^{(0)} = -\frac{e^2}{2a_Б} + \frac{e^2}{8a_Б} = -\frac{3}{8}\frac{e^2}{a_Б}$$

$d_z^2 = (er\cos\theta)^2$

$<100|d_z^2|100> = e^2 a_Б^2$

Рассмотрим на примере 2 близких уровней. Если их слить, то теория (вырожденных уровней) возмущений будет работать.

Пример: 2 δ-ямы, удаленные на большое расстояние



Гамильтониан можно представить в виде $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$

$(E - E_k^{(0)})c_k = \sum_m V_{km}c_m$

$$\left.\begin{aligned} (E - E_1^{(0)})c_1 &= V_{11}c_1 + V_{12}c_2 \\ (E - E_2^{(0)})c_2 &= V_{22}c_2 + V_{21}c_1 \end{aligned}\right\}$$

Ищем Ψ

$$\begin{vmatrix} E - E_1^0 - V_{11} & -V_{12} \\ -V_{21} & E - E_2^0 - V_{22} \end{vmatrix} = 0$$

$$E_{2,1} = E_\pm = \frac{1}{2}(E_1^{(0)} + E_2^{(0)} + V_{11} + V_{22}) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(E_1 + V_{11} - E_2 - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2} \qquad (A)$$

$\Psi_\pm \leftarrow E_\pm \rightarrow \{c_1^{(0)}c_2^{(0)}\}_\pm$

Заметим, что задачу мы решили точно.

Еще заметим: H_0, V – не диагональны в новом базисе, $\Psi_\pm$

однако $H_0 + V$ – диагонален.

В этом состоит принц. разница между случаем вырожденным и случаем близких уровней.

$E_1^{(0)} = E_2^{(0)} \qquad E_\pm = E^{(0)} + \frac{1}{2}(V_{11} + V_{22}) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(V_{11} - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2}$

$|E_1^0 - E_2^0| \gg |V_{12}| \sim |V_{11}| \sim |V_{22}| \rightarrow$

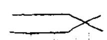
$$E_- = E^{(0)} + V_{11} + \frac{|V_{12}|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}}$$

$$E_+ = E^{(0)} + V_{22} + \frac{|V_{12}|^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}}$$

Смотрим на эту формулу и формулируем теорему о непересечении уровней.

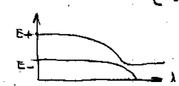
Пусть наше возмущение зависит от некоторого параметра λ, $V = V(\lambda)$

Чтобы было пересечение, надо:



$$\begin{cases} E_1 - E_2 + V_{11}(\lambda) - V_{22}(\lambda) = 0 \\ V_{12}(\lambda) = 0 \end{cases}$$

Как правило, такая система решений не имеет.



Штарк эффект для второго уровня.

Второй уровень: $\underset{2s}{\overline{}}\ \underset{2p}{\overline{m=1}}\ \underset{2p}{\overline{m=0}}\ \underset{2p}{\overline{m=-1}}$

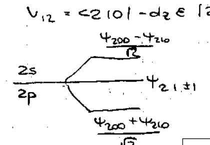
$V = -e\mathcal{E}z \qquad [\ell_z, V] = 0 \qquad <\dots m|V|\dots m'> \sim \delta_{mm'}$

т.е. возмущение не меняет проекции момента

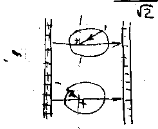
$\underset{2s}{\overline{\ell=0}}\ \underset{2p}{\overline{m=1}}\ \underset{2p}{\overline{m=0}}\ \underset{2p}{\overline{m=-1}} \qquad <n|V|n> = 0$

Поскольку ~~проекции~~ состояния с разными проекциями момента не смешиваются, штарк эфф для $m = 1, -1$ останется квадратичным. Смешиваться могут $2s \leftrightarrow 2p|_{m=0}$

$V_{12} = <210|-d_z\mathcal{E}|200> \qquad \begin{vmatrix} -E^{(1)} & V_{12} \\ V_{21} & -E^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow E_\pm^{(1)} = \pm|V_{12}|$



$d_{z\pm} = -\dfrac{\partial E_\pm^{(1)}}{\partial \mathcal{E}} = \mp\dfrac{|V_{12}|}{\mathcal{E}} = \mp|e|3a_Б$



$$\boxed{E^{(2)}(R) = \frac{e^4}{R^6}\sum_{n,n' \neq 1} \frac{|<n\ell m; n'\ell' m'|\overbrace{x_1x_2 + y_1y_2 - 2z_1z_2}^{3z_1z_2}|100;100>|^2}{2E_1^{(0)} - E_{n_1}^{(0)} - E_{n_2}^{(0)}}}$$

Выберем систему координат $n \parallel z$

$$<210|-er\cos\theta|200> = |e|a_Б \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^{1} d\cos\theta \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta(\cos\theta)\frac{1}{\sqrt{4\pi}}}_{1/\sqrt{3}} \int_0^\infty r^2 dr \frac{r}{2\sqrt{6}} e^{-r/2}\,(r)\cdot$$

$$\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 - \frac{r}{2}\right)e^{-r/2} = -3|e|a_Б$$

$1/\sqrt{3}$ $1/2$

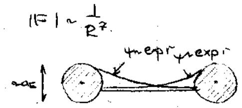
Пункт 5. Природа сил Ван-дер-Ваальса.

H – H   два атома водорода

Еще сферической симметрией обладают He, Ne, Ar, Kr, Xe

Было замечено, что между такими атомами ∃ притяжение, такие силы

$|F| \sim \dfrac{1}{R^7}$



Откуда берутся эти силы?

Если раскладывать потенциал, то и дипольный потенциал, и квадрупольный будут равны 0.

$V = \dfrac{\bar{d}_1\bar{d}_2 - 3(\bar{d}_1\bar{n})(\bar{d}_2\bar{n})}{R^3} \qquad <V> \equiv 0 \leftarrow$ поскольку ср. дипольные моменты $= 0$

$E^{(2)}(R) = -\dfrac{const}{R^6} \qquad const > 0$

Что это за константа?   const – размерность $e^2 a_Б^5$

Для 2-х атомов H   const $= 6{,}5\, e^2 a_Б^5$

2-х атомов He   const $= 1{,}5\, e^2 a_Б^5$