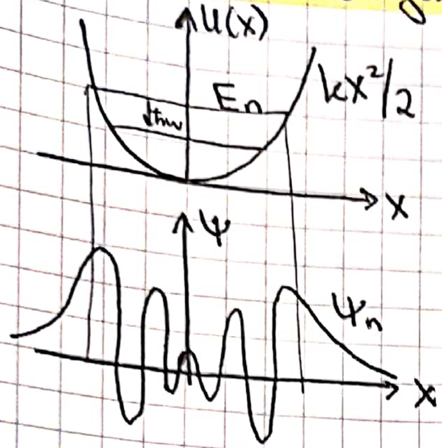
Семинар 6 (12.10.20)

Колебательные и вращательные уровни. Водородоподобные атомы.

1 Квантовый осциллятор



$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{kx^2}{2}\psi=E\psi$$

реш: — в виде полиномов Чебышева-Эрмита

$$\boxed{E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)} \quad 1D$$

в опт. диап. — правила отбора —

— переход м/у соседн. уровнями

(у фотона импульс 1)

3D: $\boxed{E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{3}{2}\right)}$ ← т.к. E_x, E_y, E_z — независ.

ВКБ: метод Вентцеля-Крамерса-Бриллюэна ↳ Ципенюк,
Сивухин — адаптир.
Ландау — четко

(прибл. реш. УШ)

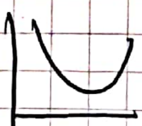
ищется характ. длина, на пот. осц. дне

На ней уклад. целое число полуволн де-Бройля

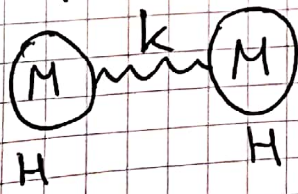
$$\left.\begin{aligned} L_n &= n\frac{\lambda}{2}=n\frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2E_n m}} \\ \frac{1}{2}m\omega^2 L_n^2 &= E_n \end{aligned}\right\} \quad E_n=\underbrace{\frac{\pi}{2}}_{\text{дань прибл.}} n\hbar\omega \quad \text{↳ уровни эквидист.}$$

$$n=0:\quad \frac{kx^2}{2}+\underbrace{\frac{\hbar^2}{2m(2x)^2}}_{p^2/2m}=E$$

$$\frac{dE}{dx}=0 \;\;↳\;\; E^*=\frac{1}{2}\hbar\omega$$



Энергия колеб. кванта:



Ридберг

$$k=\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}\sim\frac{U_{характ}}{x^2_{характ}}\sim\frac{\frac{me^4}{2\hbar^2}}{r_Б^2}=\frac{m^2e^6}{2\hbar^4}$$

$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$ — в малом — пост. величина (коэф. квазиупр-ти)

$x_{характ}$ — $r_Б$; $r_Б=\left(\frac{\hbar^2}{me^2}\right)$

Для H_2

$$\Delta E_{кол} = \hbar\omega = \hbar\sqrt{\frac{k}{M}} = R\approx\sqrt{\frac{m}{M}}\cdot\sqrt{2}\,.\approx 0{,}3\,эВ$$

(M) $\overset{k}{\sim\sim}$ (M)

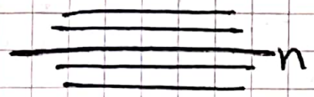
$1\,эВ = 11\,000\,К$

$\hookrightarrow$ при $3\cdot10^3\,К$ ожив. кол.

Rem H_2 дисс. при 1000 К $\hookrightarrow$ не набл. кол. уровни.

В кристаллах – кол. уровни набл.

Эквидист – при мал. n (там вып. параб. $U(x)$)



см. лаб.

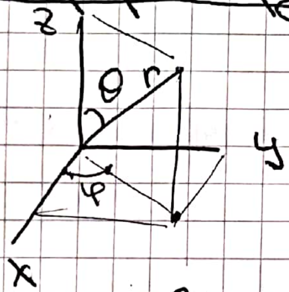
2 Квантовый ротатор

реш. УШ – с.ф. L

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2J}, \quad \vec{L} = [\vec{r}\times\vec{p}]$$

В сфер. коорд.:

$$\begin{cases} x = r\sin\theta\cos\varphi \\ y = r\sin\theta\sin\varphi \\ z = r\cos\theta. \end{cases}$$



$$\vec{e}_r = \begin{pmatrix}\sin\theta\cos\varphi\\ \sin\theta\sin\varphi\\ \cos\theta\end{pmatrix}, \quad \vec{e}_\theta = \begin{pmatrix}\cos\theta\cos\varphi\\ \cos\theta\sin\varphi\\ -\sin\theta\end{pmatrix}, \quad \vec{e}_\varphi = \begin{pmatrix}-\sin\varphi\\ \cos\varphi\\ 0\end{pmatrix}$$

$$\vec{\nabla} = \vec{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \vec{e}_\varphi\cdot\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$\Delta = \underbrace{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)}_{\Delta_r} + \underbrace{\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}}_{\frac{1}{r^2}\Delta_{\theta,\varphi}}$$

поступ. движ. $p^2/2m$ — отвеч. за L

шарообраз. фи — для g-ва

с.з. $\boxed{\Delta_{\theta,\varphi} = l(l+1)}$, l – орбит. квант. число

$$\hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = -i\hbar\,\partial/\partial\varphi$$

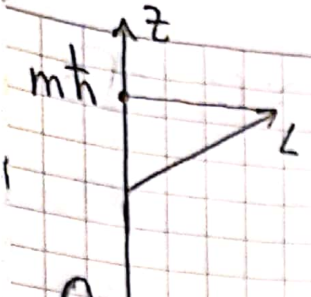
$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

$\hat{L}_x, \hat{L}_y$ – хуже $\hookrightarrow$ $\measuredangle$ проекцию на z

$$\Delta_{\theta\varphi}\Psi = l(l+1)\Psi$$

$$\Downarrow$$

$$L^2 \leq l(l+1)\hbar$$



$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$
$$\hat{L}_z\psi = L_z\psi$$
$$-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} = L_z\psi \Rightarrow \psi(\varphi) = Ae^{\frac{i}{\hbar}L_z\varphi}$$

Однозначность: $\psi(\varphi + 2\pi m) = \psi(\varphi) \Rightarrow$

$\Rightarrow \boxed{L_z = m\hbar}$ m-магнит. квантовое число

$$\langle L^2\rangle = 3\langle L_z^2\rangle = 3\cdot 2\sum_{m=0}^{l} m^2\cdot\hbar^2\cdot\frac{1}{2l+1}$$ — число состояний

$(-l)^2 + (-l+1)^2 + ... + 0^2 + 1^2 + ... + l^2$

равновер. распр-е по проекциям

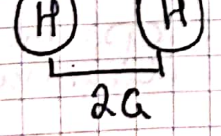
$$\sum m^2 = \frac{l(l+1)(2l+1)}{6}$$

$$\boxed{\langle L^2\rangle = \hbar^2 l(l+1)}$$

$$E_{вращ} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2J} \qquad \Delta E_{вращ} = \frac{\hbar^2 l}{J}$$

• Соотн. неопр: оп-ры коммут. ⇒ набл. одновр.
проекции мом. имп. некомм ⇒
⇒ из циркл. знаем только 2.
$\sqrt{l(l+1)} > l \Rightarrow L_z < L$ всегда (x, y неопр-прецессия)

$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \Rightarrow$ их с.ф совпад.
$\Rightarrow [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0 \Rightarrow$ их с.ф. совп.

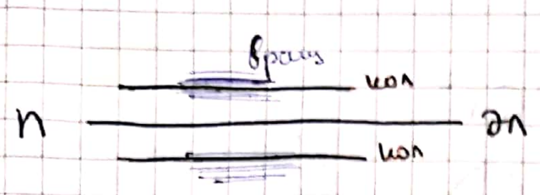


$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \qquad \Delta E_{вращ} = \frac{\hbar^2 l}{J} = \frac{\hbar^2}{\frac{M}{2}(2a)^2} = \frac{\hbar^2}{2Ma^2}$$

$$E_{вращ} = \frac{\hbar^2 m^2 e^4}{2M\hbar^4} = \frac{m}{M}\frac{me^4}{2\hbar^2} = \frac{m}{M}R_\infty \approx 0{,}008 эВ$$
$\approx 80K$
$\uparrow T_{комн}$

⇒ H_2 в комн. усл. правильн. вращение
⇒ на 2ат. молек. 2 ст. своб. $\frac{5}{2}R$

//все газы - идеал. заб. (но с) при T ↑↑ //



3 Водородоподобные атомы

слабо влияют внеш. эл-ны

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\Delta_r\Psi + \frac{1}{r^2}\Delta_{\theta,\varphi}\Psi\right) - \frac{Ze^2}{r}\Psi = E\Psi$$

решение не приводит к уширяю уровней энергии

$$U_{эфф} = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$$

центробеж. член

$\Delta_{\theta,\varphi} = l(l+1)$

$n = n_r + l + 1$

$n=1 \quad l=0 \quad 1s$

$n=2 \quad l=0 \quad 2s$

$l=1 \quad 2p$

$r_1 = \frac{\hbar^2}{Zme^2}$, $R_\infty = Z^2 R_\infty$ испори.

← переходы с внутр. об. атомов – рентген.

Бальмер $\hbar\omega = (Z-\sigma)^2 R_\infty \cdot \frac{1}{n^2}$

ближняя K об-ка $\sigma = 1$

M об-ка $\sigma \neq 1$

$$\boxed{\Psi(r,\theta,\varphi) = \Phi_n(r)\,Y_{nlm}(\theta,\varphi)}$$ – ищем реш. в таком виде

радиал. часть вф

полиномы Лежандра

четность сост. зависит от l

$\hat{P}\,Y_{n,l,m} = (-1)^l\,Y_{nlm}$

оператор четности (инверсии)

$\hat{L} = [\hat{r} \times \hat{p}]$ не мен. при $\hat{P}\hat{L}$

$\hat{P}^2 = \hat{1}$

$$\boxed{P_\Sigma = (-1)^l P_1 P_2}$$

орб. 1 части отн. др.

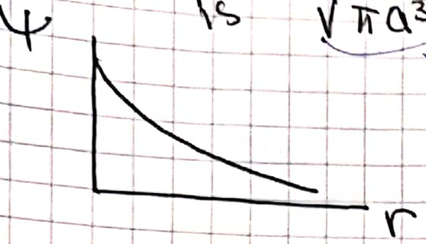
a – рад. Бора

$$\Psi(r,\theta,\varphi) = \varphi_n(r)\, Y_{nlm}(\theta,\varphi)$$

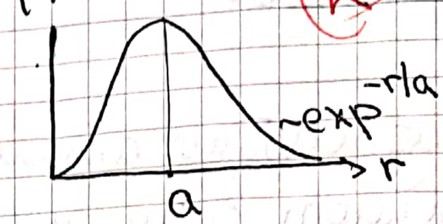
1S $\quad \psi_s = \dfrac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}$

$\int \psi^* \psi \, dV = 1$

$4\pi r^2 dr$



$|\psi|^2 \cdot 4\pi r^2$ K   [illegible]

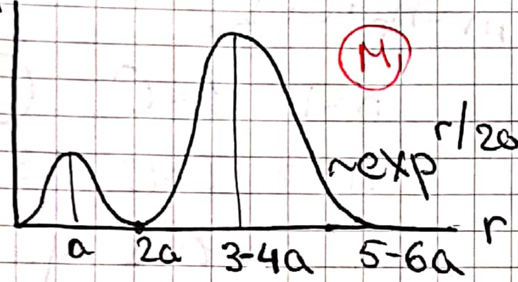


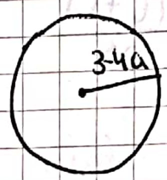
шарик, w_{max} = a – радиус

← в школе

2S $\quad \psi_{2s} = \dfrac{1}{\sqrt{8\pi a^3}} \left(1 - \dfrac{r}{2a}\right) e^{-r/2a}$

$|\psi|^2 \cdot 4\pi r^2$ M





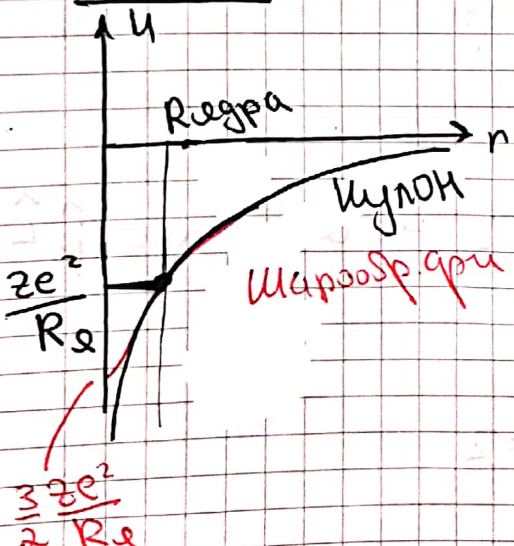
$R \sim n^2 a$

4.42 $\quad R_{ядра} = 1{,}3 \cdot 10^{-13} A^{1/3}$ см, A – атомное число

$\dfrac{\Delta E}{E}$ – ?   K-об-ка   Ne $(z=10, A=20)$

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{\pi r_1^3}} e^{-r/r_1}$$

Решение



$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{ze^2}{r} + \delta U.$$

- Теория возмущений → ВФ не мен. в зав. от δU.

$\Delta E = \langle \delta U \rangle = \int dV \cdot \psi^* \{\delta U\} \psi$ ≈

поправка в E

- $\psi_{1s}, \psi_{2s} \Rightarrow$ вер-ть перехода $1s \to 2s$ в акте удара

$R_e \to$ дальше $\delta U = 0$

вбра

$= \frac{1}{\pi r_1^3} \int_0^{r_1} e^{-2r/r_1} \{\delta U\} 4\pi r^2 dr > 0 \hookleftarrow$ поднимутся.

$\frac{R_e}{r_1} = \frac{1{,}3 \cdot 10^{-13} (2\pi)^{1/3}}{5 \cdot 10^{-9} \cdot 0{,}1} \approx 10^{-3}$, $e^{10^{-3}} \approx 1$