Семестр 6

Кл. механика (Частицы) 2.03

Система ОДУ – ур-ие дв-ия

1. ур-ия Ньютона $x(t)$, $p(t)$ – точки
2. ур-ие Лагранжа
3. ур-ие Гамильтона

Сист. ур-ий в частных производных

1ые частные производные

ур-ия Гамильтона – Якоби

Волн. наука (Оптика, Волны теор. электрич.)

Ур-ие в част. пр-ых 2го порядка – физич. поля

$E(x, t)$ – поле

приближ. : через част. пр. 1го порядка

Лучевое приближ. (лучев. оптика)

оптико-мех. аналогия

L если добавить $2^{ые}$ ч. пр. ⇒
~~волнов. мех~~ — Кв. механика

Потенц. поле $x, \dot{x}$ — неизв.

$V(x)$ — пот. энергия ч-цы в (·) x

$T(\dot{x}) = \frac{m\dot{x}^2}{2}$

$L(x, \dot{x}) = T(\dot{x}) - V(x)$ — ф-ция Лагранжа ⇒

⇒ ур-ие Лагранжа

$x(t)$, $p(t)$

$p = m \cdot \dot{x}$

$H(x, p) = T(p) + V(x)$ — полная энергия с-мы

$T(p) = \frac{p^2}{2m}$ — ф-ция Гамильтона

$H(x, p) = p \cdot \dot{x} - L(x, \dot{x})$

x и p — независимые

Ур-ие Гамильтона:

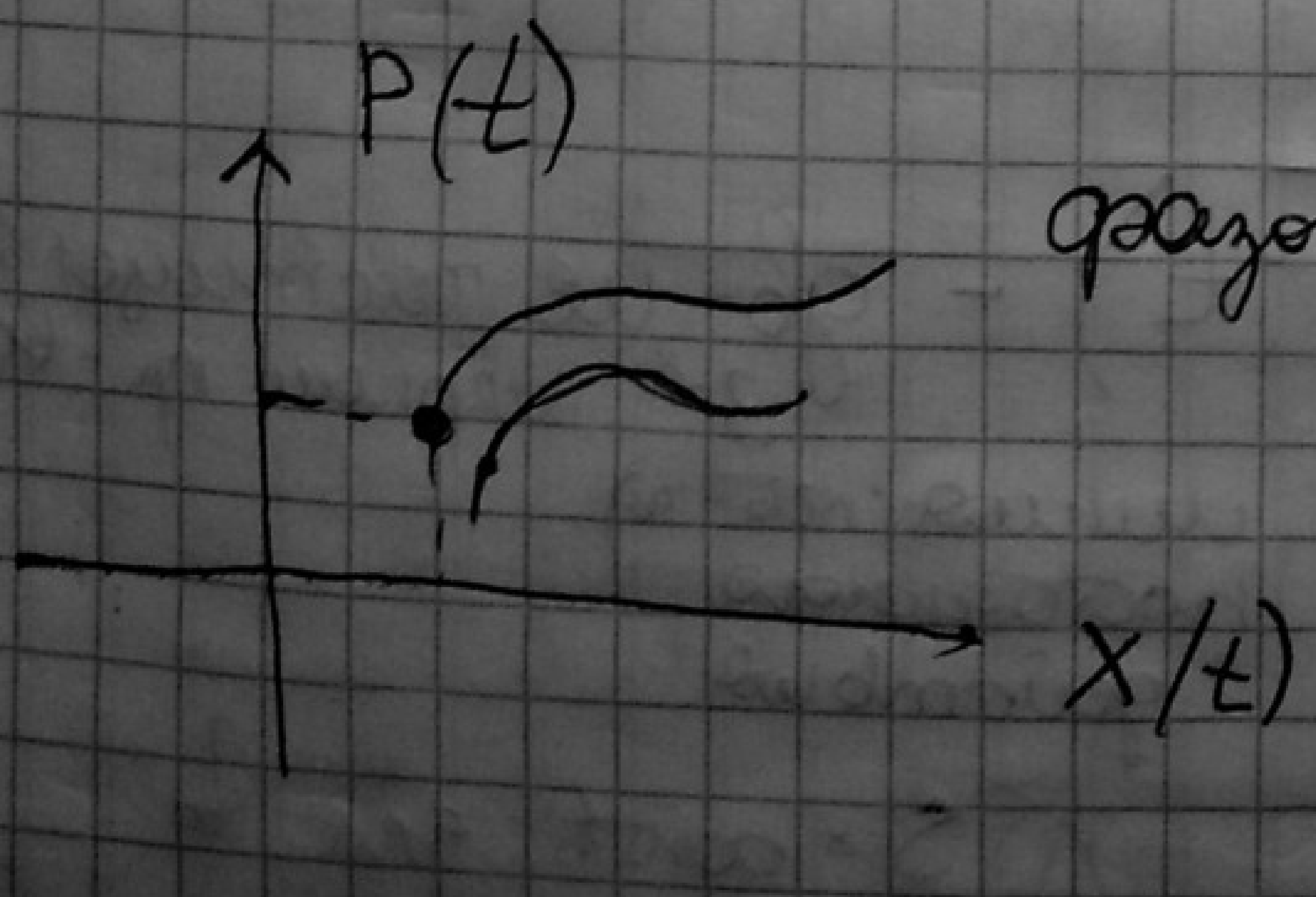
$$\begin{cases} \dot{p} = -\dfrac{\partial H(p,x)}{\partial x} \\[2ex] \dot{x} = +\dfrac{\partial H(p,x)}{\partial p} \end{cases}$$

Скобка Пуассона:

$$\{f(x,p), \varphi(x,p)\} \overset{\text{по опр.}}{\equiv} \frac{\partial f(x,p)}{\partial x} \cdot \frac{\partial \varphi(x,p)}{\partial p} - \frac{\partial f(x,p)}{\partial p} \cdot \frac{\partial \varphi(x,p)}{\partial x}$$

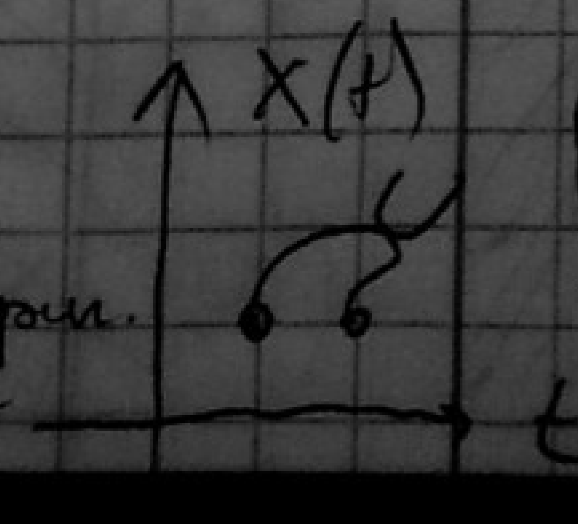
$$\begin{cases} \dot{p} = \{p, H\} = 0 \cdot \dfrac{\partial H}{\partial p} - 1 \cdot \dfrac{\partial H}{\partial x} = -\dfrac{\partial H}{\partial x} \\[2ex] \dot{x} = \{x, H\} = \underline{1} \cdot \dfrac{\partial H}{\partial p} - 0 \cdot \dfrac{\partial H}{\partial x} = \dfrac{\partial H}{\partial p} \end{cases}$$

$$\boxed{\{x, p\} = \underline{1} \cdot 1 - 0 = \underline{1}}$$



фазов. траект. – единств. !!!
в фазов. пр-ве

НО
в конфиг. пр-ве



!

$$S(t) = \int_{t_0}^{t} L\left(x(t), \dot{x}(t)\right) dt$$

действие — $S(t)$; траектория частицы — $x(t)$

$[S(t)]$ = эрг · сек

имп · коорд = эрг · сек

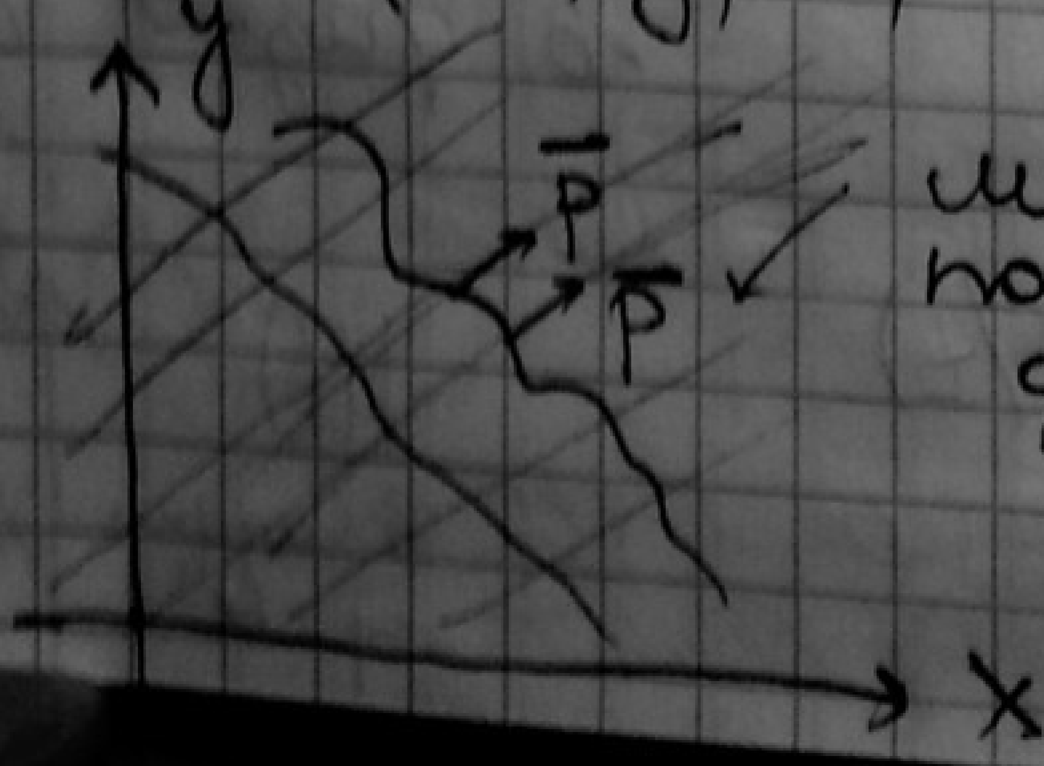
$$\begin{cases} \dfrac{d}{dt} S(t) = L\left(x(t), \dot{x}(t)\right) \\ \dfrac{\partial S}{\partial x} = p \end{cases}$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -H(x, p)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -H\left(x, \frac{\partial S}{\partial x}\right) = -\left(\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + U(x)\right)$$

$S = S(x, t)$ ур-ие Гам. - Якоби

$S = S(x, y, z, t)$ — дв-ие частицы в 3-х мерном пр-ве



линия (пов-ть) постоянного действия

S = const для [illegible]

нормали — импульсы частиц.

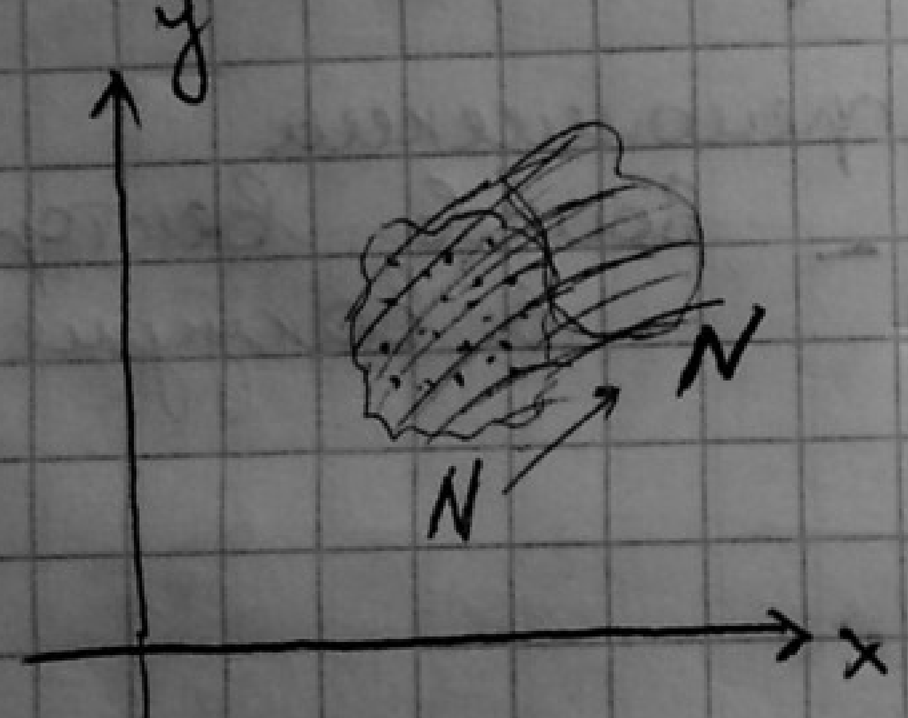
метод характеристик ≡ метод траекторий

$$S(x,t) = -E\cdot t + S_0(x,y,z)$$

E — полн. энергия с-мы

S_0 — укороч. действие без t

$$\left(\frac{\partial}{\partial x}S_0\right)^2 = 2m\left(E - V(x)\right) \text{ — ур-ие Гам. без } t$$



N — число α-ых частиц

$\frac{N}{V} = \rho$ — объемн. плотн. частиц

Закон сохр. числа частиц

$\vec{J}$ — вект. пл-ти числа частиц

$$\vec{J} = \rho\cdot\vec{v}$$

З.С. в дифф. форме: $\frac{\partial\rho}{\partial t} + \mathrm{div}(\rho\cdot\vec{v}) = 0$

$$\int_V \frac{\partial\rho}{\partial t}\,dV = \dot{N}(t) = -\int_V dV\cdot\mathrm{div}(\rho\cdot\vec{v}) =$$

$$= -\int_{\Sigma} \rho\,(\vec{v}, d\vec{\Sigma})$$

$$\vec{p} = m \cdot \vec{v} = \nabla S(x, y, z, t)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}\left(\rho \cdot \frac{1}{m} \nabla S\right) = 0$$ — З. С в дифф. ф.

Оптика

$\vec{k}$ — волновой вектор

$$k(x, y, z) = k_0 \cdot n(x, y, z)$$

n — коэфф. преломления

$$k_0 = \frac{2\pi}{\lambda_0} = \frac{2\pi \cdot \omega}{2\pi c} = \frac{\omega}{c}$$ — волнов. вектор в вакууме

$$\lambda_0 = T \cdot c = \frac{2\pi}{\omega} \cdot c$$

$$\lambda(x, y, z) = T \cdot v(x, y, z)$$

v — фазов. скорость (разная)

$$f(x, y, z, t)$$

$$\Delta f(x, y, z, t) - \frac{1}{v^2(x, y, z)} \cdot \frac{\partial^2}{\partial t^2} f(x, y, z, t) = 0$$

$$f(x, y, z, t) = \underset{\text{амплитуда}}{a} \cdot e^{\underbrace{i \cdot k_0 \cdot \Theta(x, y, z, t)}_{\text{фаза волны}}}$$

$$f(x,y,z,t) = F(x,y,z)\,e^{i\omega t}$$

ур-ие Гельмгольца

$$\Delta F(x,y,z) = \frac{\omega^2}{v^2(x,y,z)} \cdot F(x,y,z) =$$

$$= \left(k(x,y,z)\right)^2 \cdot F = k_0^2 \cdot n^2(x,y,z) \cdot F(x,y,z)$$

$$F(x,y,z) = A e^{i k_0 \theta(x,y,z)}$$

$$k_0 \to \infty \qquad \frac{2\pi}{\lambda_0} \to \infty \qquad \lambda_0 \to 0$$

$$\frac{\partial^2 F(x)}{\partial x^2} = -k_0^2 \cdot n^2(x) \cdot F(x)$$

$$\frac{\partial F}{\partial x} = \frac{\partial A}{\partial x} e^{i k_0 \theta(x)} + i k_0 \cdot \frac{\partial \theta(x)}{\partial x} A e^{i k_0 \theta(x)}$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x^2} = \left(\frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial A}{\partial x} i k_0 \cdot \frac{\partial \theta}{\partial x} + i k_0 \cdot \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} A -\right.$$

$$\left. + k_0^2 \left(\frac{\partial \theta}{\partial x}\right)^2 A\right) \cancel{e^{i k_0 \theta}} \cancel{= k_0^2 n^2 A e^{i k_0 \theta}}$$

$$+ k_0^2 \left(\frac{\partial \theta}{\partial t}\right)^2 \cancel{A e^{i k_0 \theta}} = k_0^2 n^2 \cancel{A e^{i k_0 \theta}}$$

$$\left(\frac{\partial \theta}{\partial x}\right)^2 = n^2 \qquad \left(\frac{\partial S_0}{\partial x}\right)^2 = 2m(E - V)$$

ур-ие лучей

16.03 ур-е макс. Волны.

$E(x, y, z, t)$

$$\nabla E = \frac{1}{c^2} n^2(x,y,z) \frac{\partial^2}{\partial t^2} E$$

лучев. оптика, лучи – траектория частицы

$$E = a e^{i k_0 \varphi(x)} e^{i\omega t}, \quad k_0 \to \infty$$

$$k_0 = \frac{\omega}{c}$$

фаза волны

$$k_0^2 : (\vec{\nabla}\varphi)^2 = n^2(x,y,z)$$

$$k_0 : a \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi + 2\frac{\partial \varphi}{\partial x} \cdot \frac{\partial a}{\partial x} = 0$$

$\cancel{\frac{\partial^2}{\partial x^2} a}$ – дает лучи и отобр. дифракцию

$$\varphi \sim S$$

$$n^2(x,y,z) \sim 2\cdot\mu\,(E - v(x,y,z))$$

$$\operatorname{div}(a^2 \cdot \vec{\nabla}\varphi) = 0$$

для (x, y, z)

З. с. числа частиц : $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathrm{div}(\rho \cdot \vec{\nabla} S) = 0$

стац. случай

Э. Шредингер

Описать мех. волнов. ур-ем

$\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ $\Psi(x, y, z, t)$ волн. ф-ция (комплексн.)

$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, y, z, t)$ ~~=~~

$\hbar$ – пост. Планка [эрг · сек]

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right) \Psi(x, t)$$

$$\Psi(x, t) = U(x) e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$$

$$E \cdot U(x) \cdot \cancel{e^{-i\frac{Et}{\hbar}}} = \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right) U \cancel{e^{-i\frac{Et}{\hbar}}}$$

ур-ие Гельм - Гольца (Стац. ур-ие Шред.)

$\hbar \to 0 \Rightarrow$ ур-ие Гам. - Як., з. с. ч. част.

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} u = \frac{(V(x) - E) 2\mu}{\hbar^2} \cdot U(x)$$

$$k_0 \sim \frac{1}{\hbar}$$

$$\psi(x) = a(x)\, e^{i\frac{S(x)}{\hbar}}$$

$$k_0\varphi \sim \frac{S(x)}{\hbar}$$

$$\frac{1}{\hbar^2}$$

$$\frac{1}{\hbar}$$

$\frac{\partial^2(a(x))}{\partial x^2}$ пренебрегаем

$$(\vec{\nabla} S)^2 = 2\mu(\overset{\text{полн.}}{E} - \overset{\text{потенц.}}{V}) \longleftrightarrow \frac{1}{\hbar^2}$$

$$\mathrm{div}\,(a^2 \cdot \vec{\nabla} S) = 0 \longleftrightarrow \frac{1}{\hbar}$$

Если $\hbar \to 0$, то $S(x)$ — классич. действие (ур. Г.-Як.)

ρ — пл. числа частиц

$\hbar \to 0 \qquad \rho \to a^2(x)$

$$\mathrm{div}\,(a^2 \cdot \vec{\nabla} S) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(a^2 \cdot \frac{\partial S}{\partial x}\right) = 0$$

$$2a\frac{\partial a}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial x} S + a^2 \cdot \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} = 0$$

$$2\frac{\partial a}{\partial x} \cdot \frac{\partial S}{\partial x} + a\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} = 0 \qquad \frac{\partial S}{\partial x} = p$$

$$\frac{\frac{\partial a}{\partial x}}{a} = -\frac{1}{2}\frac{\frac{\partial p}{\partial x}}{p}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\ln a = -\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}\ln p$$

$$\ln a = -\frac{1}{2}\ln p$$

$$\ln(a) = \ln\frac{1}{\sqrt{p}}$$

$$a(x) = \frac{A}{\sqrt{p}}$$

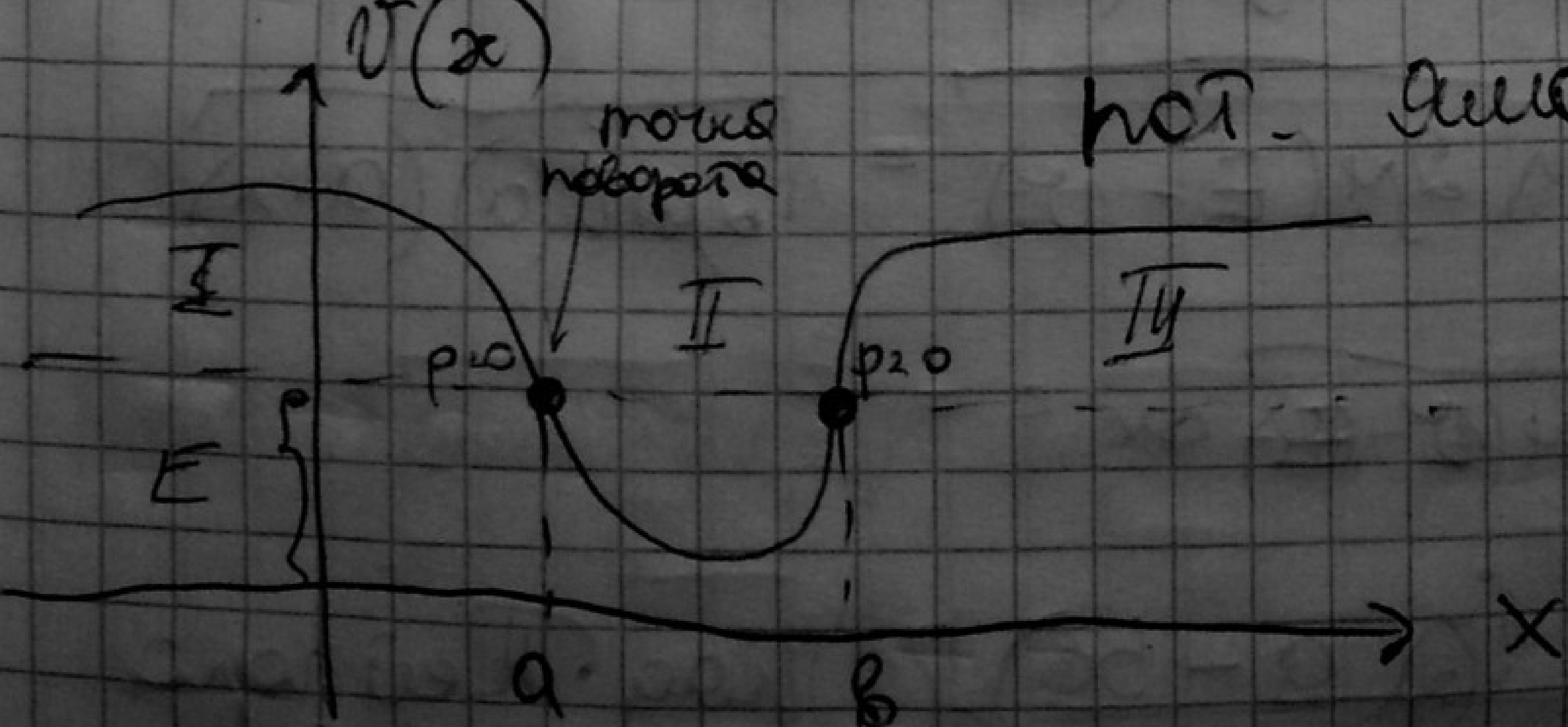
$$E - U = \frac{p^2}{2m}$$

$$2m(E - V) = p^2$$

$$p = \sqrt{2m(E-V)}$$

$$u(x) = \frac{A}{\sqrt{p}} e^{i\frac{S(x)}{\hbar}}$$ – решение в квазиклассич. приближении

пот. яма



$$W(x) = u(x)$$

$$p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$$

I : $p(x) = \pm i\sqrt{2m(V(x)-E)}$

III : $p(x) = \pm i\sqrt{2m(V(x)-E)}$

II : $p = \sqrt{2m(E-V)}$

гранично. за пот. стенку (ч/з (·) поворота)

метод ВКБ (Вентцель, Крамерс, Бриллюэн)

нужно сшить решения:

I : $u(x) = \dfrac{A}{\sqrt{p}} \cdot e^{i\frac{S(x)}{\hbar}}$

$p = \sqrt{2m(V(x)-E)}$ //

Ур-ие Г.-Я. :

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} S\right)^2 = 2\mu(E-V)$$

$$\frac{\partial S}{\partial x} = \sqrt{2\mu(E-V)} = \sqrt{2m\dot{V}(a)(a-x)}$$

$$S = \pm i\int_x^a \sqrt{2\mu(\cancel{V}-\cancel{E})}\,dx =$$

$$(V-E) = \dot{V}(a)(a-x)$$

ряд Тейлора в окр. (·) a

берем $+i$

$$\int_x^a \sqrt{2m\dot{v}(a)(a-x)}\,dx =$$

$$u^{(I)}(x) = \frac{A}{\sqrt{p}} e^{-\int_x^a \sqrt{2m\dot{v}(a)(a-x)}\,dx}$$

23.03

$$E \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + v(t)\right)\Psi(x,t)$$

$$\Psi(x,t) = e^{-iEt} \cdot W(x)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + v(t) - E\right)W(x) = 0$$

$$\underline{\underline{W_I}}(x) \cong \frac{A_1}{2\cdot\sqrt{p}} e^{-\int_x^a p\,dx} + \frac{A_2}{\sqrt{p}} e^{+\int_x^a p\,dx}$$

↑ не имеет смысла

$$p_I = \sqrt{2m(v(x)-E)} > 0 \Rightarrow A_2 = 0$$

$$\underline{\underline{W_{III}}}(x) \cong \frac{A_3}{2\cdot\sqrt{p}} e^{-\int_b^x p\,dx}$$

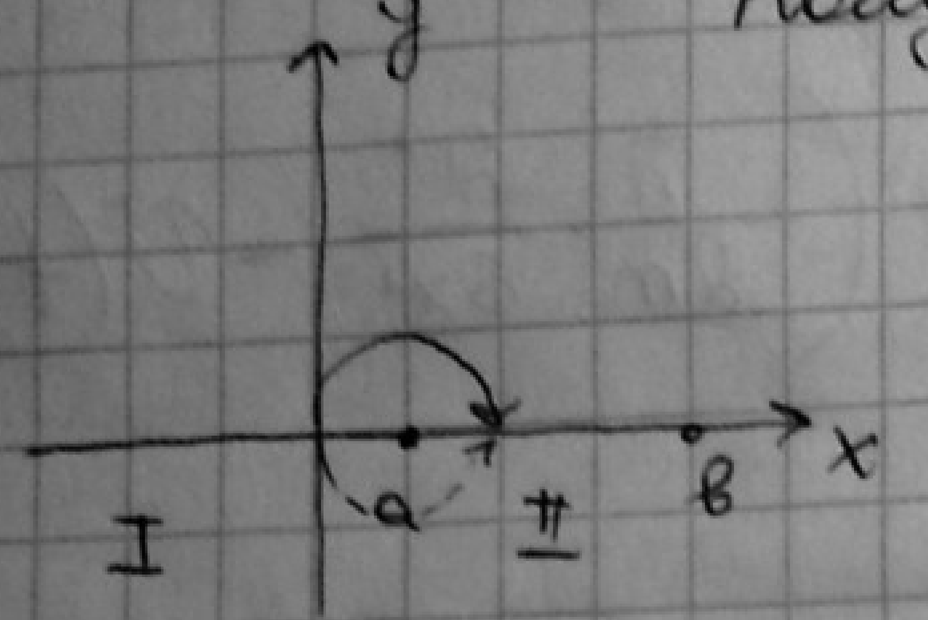
$$W_{II}(x) \cong \frac{A_2}{\sqrt{p}} e^{+i\int_a^x p\,dx} + \frac{B_2}{\sqrt{p}} e^{-i\int_a^x p\,dx}$$

$$p_{III} = \sqrt{2m(E - v(x))}$$

$$p(x)\big|_a = 0 \qquad p(x)\big|_b = 0$$

Крамерс: перейти из $I^{ой}$ обл. во $II^{ую}$ ~~по~~

~~веществ. в комплексной~~ по комплексной плоскости (можно 2-мя способами — по верхн. полупл. и по нижней)



Амплитуды A_1, A_2, A_3 и B_2 пока не опред. Нужно произвести сшивку, чтобы их найти (сшивка — способ связать эти конст. м/у собой так, чтобы осталась одна)

$$U(x) = \overset{E}{U(a)} + \dot{U}(a)\cdot(x-a) =$$

из I→II – „ – "

I→III – „ + "

$$= E + |\dot{U}(a)|(a-x)$$

$$\int_x^a p\,dx = \int_x^a \sqrt{2m(\cancel{E} + |\dot{U}(a)|(a-x) - \cancel{E})}\,dx =$$

$$= \sqrt{2m|\dot{U}(a)|}\int_x^a \sqrt{a-x}\,dx = \frac{2}{3}\sqrt{2m|\dot{U}(a)|}\,(a-x)^{3/2}$$

$$W_I(x) = \frac{A_1}{2\sqrt[4]{2m|\dot{U}|}\,(a-x)^{1/4}}\, e^{-\frac{2}{3}\sqrt{2m|\dot{U}|}(a-x)^{3/2}}$$

$$W_{II}(x) = \frac{A_2}{\sqrt[4]{2m|\dot{v}|}\,(x-a)^{1/4}}\, e^{+i\frac{2}{3}\sqrt{2m|\dot{v}|}\,(x-a)^{3/2}} +$$

$$+ \frac{B_2}{\sqrt[4]{2m|\dot{v}|}\,(x-a)^{1/4}}\, e^{-i\frac{2}{3}\sqrt{2m|\dot{v}|}\,(x-a)^{3/2}}$$

$$p = \sqrt{2m(E - E + |\dot{v}|(x-a))} = \sqrt{2m|\dot{v}|}\cdot\sqrt{x-a}$$

$$\int_a^x p\,dx = \frac{2}{3}\sqrt{2m|\dot{v}|}\,(x-a)^{3/2}$$

$$W_{I}(x) = \frac{A_2}{\sqrt[4]{2m|\dot{v}|}\,(a-x)^{1/4}(-1)^{1/4}}\, e^{i\frac{2}{3}\sqrt{2m|\dot{v}|}\,(-1)^{3/2}(a-x)^{3/2}} +$$

$$+ \frac{B_2}{\sqrt[4]{2m|\dot{v}|}\,(-1)^{1/4}(a-x)^{1/4}}\, e^{-i\frac{2}{3}\sqrt{2m|\dot{v}|}\,(-1)^{3/2}(a-x)^{3/2}}$$

$$(-1)^{3/2} = \left((-1)^3\right)^{1/2} = (-1)^{1/2} - ? \qquad (-1)^{\frac{1}{4}} - ? \qquad e^{i\frac{\pi}{4}} \quad e^{-i\frac{\pi}{4}}$$

если переходим ч/з верхн. полупл., то мнимая часть д/б положительной и наоборот

$$: \cancel{e}\ (-1)^{1/4} = e^{i\frac{\pi}{4}}, \quad (-1)^{1/2} = e^{i\frac{\pi}{2}}$$

$$: (-1)^{1/4} = e^{-i\frac{\pi}{4}}, \quad (-1)^{1/2} = e^{-i\frac{\pi}{2}}$$

$$W_I(x) \underset{\text{верхн. п/п}}{\Rightarrow} \frac{A_1}{2\sqrt[4]{2m|\dot{v}|}\,(x-a)^{1/4} e^{i\pi/4}}\, e^{-\frac{2}{3}\sqrt{2m|\dot{v}|}\,(x-a)^{3/2} i}$$

$$\frac{A_1 e^{-i\frac{\pi}{4}}}{2\cancel{\sqrt[4]{2m|v'|}}} = \frac{B_2}{\cancel{\sqrt[4]{2m|v'|}}} \Rightarrow B_2 = \frac{A_1}{2} e^{-i\frac{\pi}{4}}$$

$$W_I(x) \xrightarrow[\text{п/п}]{\text{нижняя}} \frac{A_1}{2\sqrt[4]{2m|v'|}\,(x-a)^{1/4}\, e^{-\frac{\pi}{4}i}}\, e^{+\frac{2}{3}\sqrt{2m|v'|}\,(x-a)^{3/2} i}$$

$$A_2 = e^{i\frac{\pi}{4}} \frac{A_1}{2}$$

$$W_{II}(x) = \frac{A_1}{\cancel{2}} \frac{1}{\sqrt[4]{2m|v'|}} \frac{1}{(x-a)^{1/4}} \cos\left(\int_a^x p\,dx + \frac{\pi}{4}\right)$$

Общ. ф-ла ~~сшивк~~ сшивки:

$\hbar = 1$

$$\frac{C}{2\sqrt{p}}\, e^{-\frac{1}{\hbar}\left|\int_a^x p\,dx\right|} \longrightarrow \frac{C}{\sqrt{p}} \cos\left(\frac{1}{\hbar}\left|\int_a^x p\,dx\right| - \frac{\pi}{4}\right)$$

Принцип квантования энергии E

Бора – Зоммерфельда

$\overrightarrow{x>a}$ $$W_{II} = \frac{C}{\sqrt{p}} \cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\,dx - \frac{\pi}{4}\right)$$

$\overleftarrow{x<b}$ $$\tilde{W}_{II} = \frac{\tilde{C}}{\sqrt{p}} \cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^b p\,dx - \frac{\pi}{4}\right)$$

$$W_{II} = \tilde{W}_{II} \quad (\text{везде})$$

$$\begin{cases} \dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_a^b p\,dx - \dfrac{\pi}{2} = n\cdot\pi, \quad n\in\mathbb{Z} \\ C = (-1)^n\cdot\tilde{C} \end{cases} \qquad (*)$$

— условие, при котором ф-ии W_I и W_{II} совпадают (проверить!!!)

$W_{II} - n\pi = \widehat{W}_{II}$

~~Фиксир. E~~

~~не для всех E~~

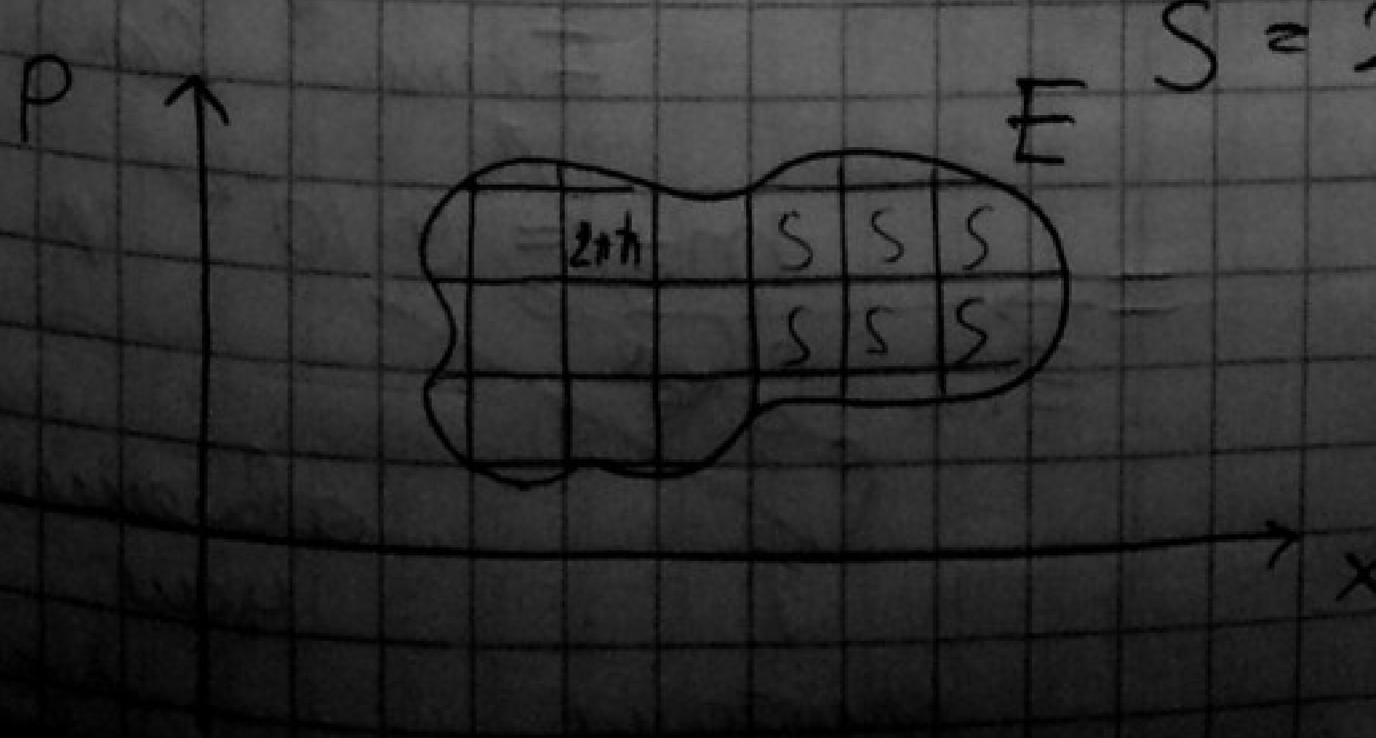
Мы можем получ. единый шт для всех областей не для всех E, только для какого-то фикс. знач., удовлет. усл. (*)

$$\int_a^b \sqrt{2m(E-U(x))}\,dx = \left(\frac{\pi}{2}+\pi n\right)\hbar = \left(\frac{1}{2}+n\right)\cdot\pi\cdot\hbar$$

$$\frac{2\displaystyle\int_a^b p\,dx}{2\pi\hbar} = n+\frac{1}{2}$$

$$\frac{\oint p\,dx}{2\pi\hbar} = n+\frac{1}{2}$$ — УСЛОВИЕ КВАНТОВАНИЯ

$S = 2\pi\hbar$

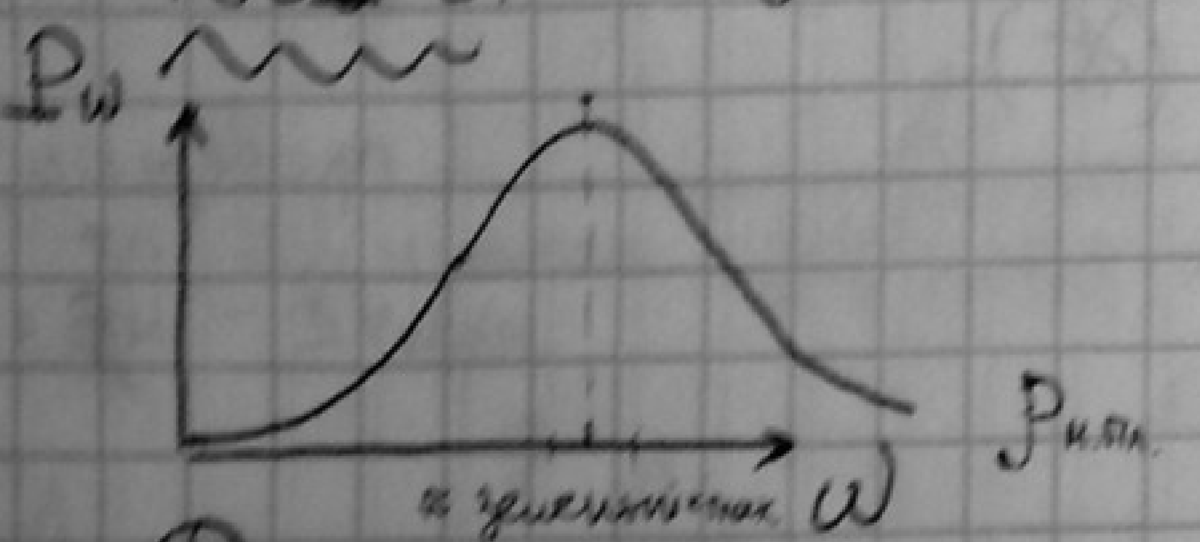


ФАЗОВОЕ ПР-ВО

СОСТОЯНИЕ ОПРЕД. КЛЕТКОЙ С $S = 2\pi\hbar$

30.03 1900 год

300Е 1901 г. – М. Планк



P_ω – спектральная плотность мощности

ω – мощность

Рэлей и Джинс

$$\rho_{класс.}(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^2} kT$$

$\hbar = 10^{-27}$ эрг·сек

$$\rho_{М.Пл.} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \cdot \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}$$

1905 г – Noble Prize А. Эйнштейн

Фотоэффект, приписал свету св-ва частиц,

$\vec{k}$ – волновой вектор

волны: $\omega, \vec{k}$ частицы: $E, \vec{p}$

$E = \hbar\omega$, $\vec{p} = \hbar\vec{k}$

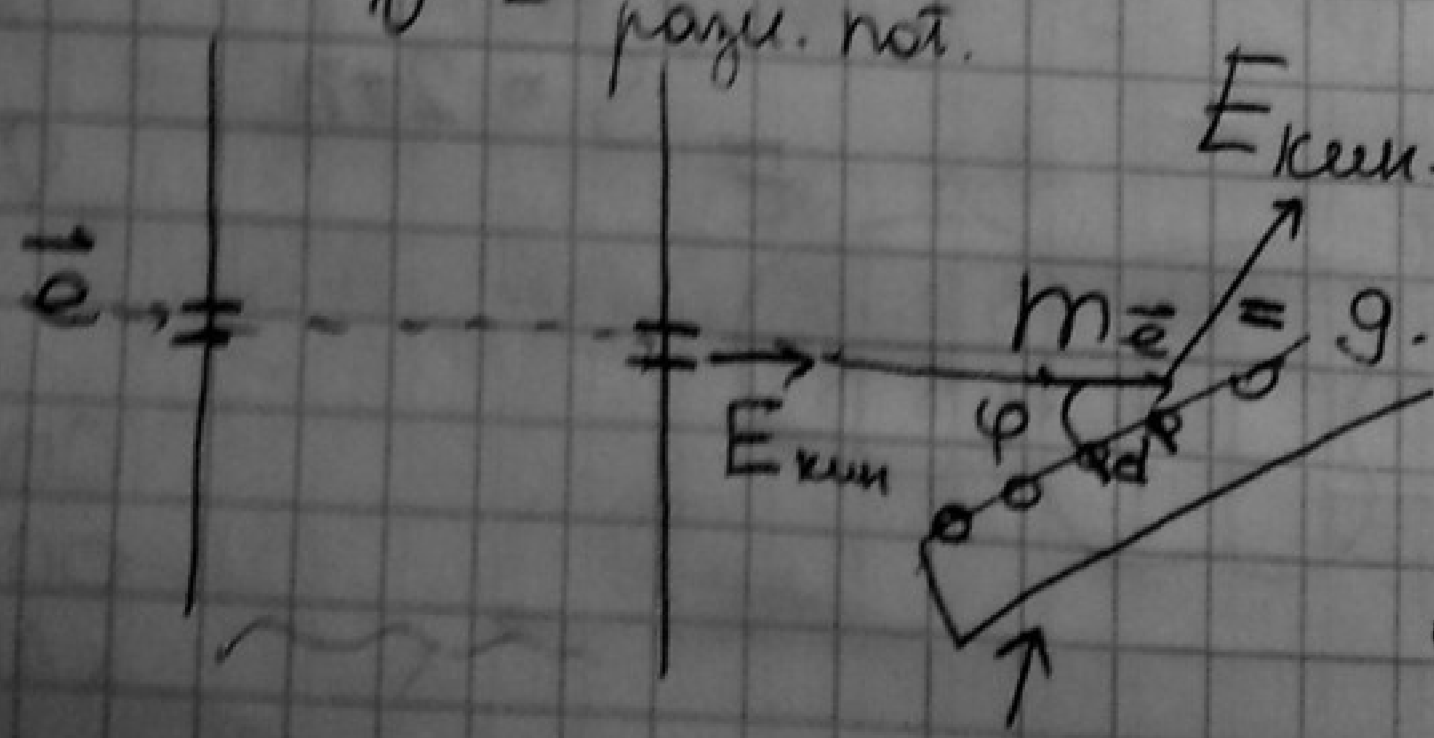
связал волновые св-ва с частицами

Томсон-Тартаковский

$\vec{V}$ – разн. пот.

$$E_{кин.} = \frac{p^2}{2m} = eV$$

$m_{\vec{e}} = 9 \cdot 10^{-28}$ гр



явление дифракции

λ – ?

$n\lambda = 2d \cdot \sin\varphi$

Оказывается: $p = \sqrt{2meV}$, $\lambda = \dfrac{2\pi\hbar}{p}$

λ ↑ длина волны Де-Бройля

$\vec{p}, E \leftrightarrow \lambda, \vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda}$

Ур-ие Шредингера для своб. дв-ия

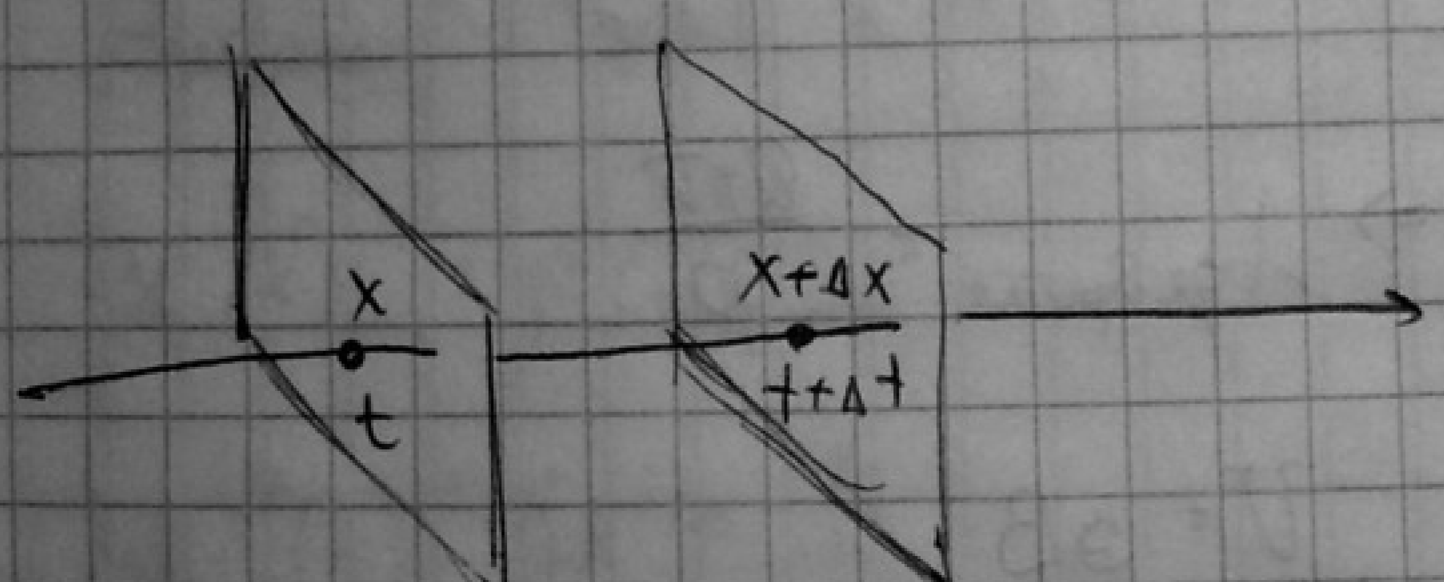
$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi$$

$V = const = 0$ (~~нет~~ пот. энерг.)

$$\Psi(\vec{r}, t) = A \cdot e^{-i \cdot \frac{1}{\hbar}(E \cdot t - \vec{p} \cdot \vec{r})}$$ – плоская волна (т.к. фазовый фронт – плоск. $\perp \vec{p}$)

$\Phi(t, \vec{r}) = Et - \vec{p}\,\vec{r}$ – фаза

Если фикс. t ⇒ получим пл-ть



$V = \dfrac{E}{p} = V_{фазовая} = \dfrac{p}{2m}$ – скорость перем. фазов. фронт

E – полная энергия

Дисперсионн. соотношение (связь E и p)

$$E = \frac{p^2}{2m} = E_{кин.}$$

$V_{групп.}$ (скорость перем. группы волн)

1. линейность

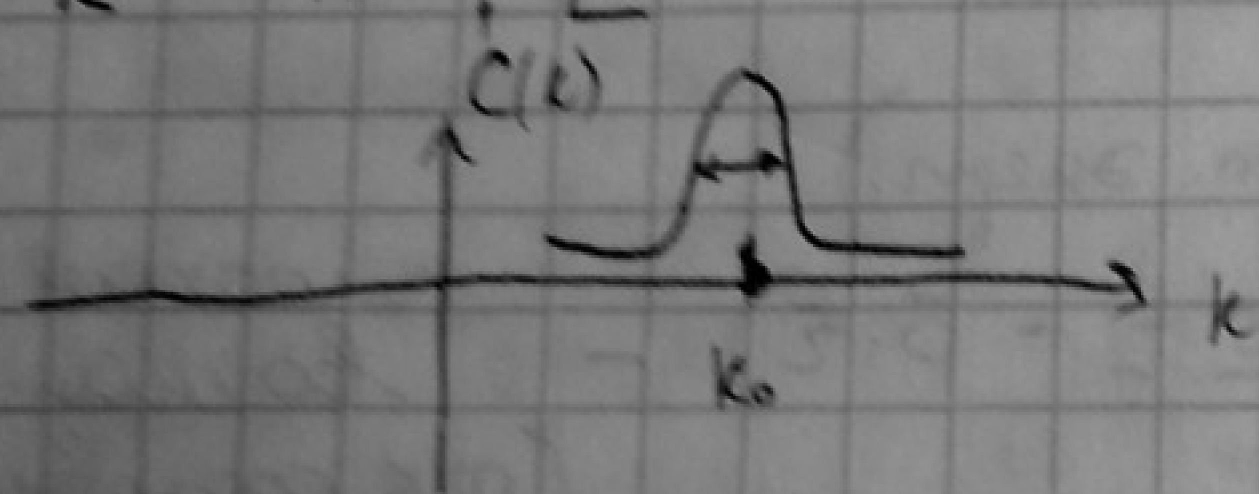
2. принцип суперпозиции Ψ_1, Ψ_2

$$\Psi = \alpha \Psi_1 + \beta \Psi_2$$

$$\int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} c(k) \cdot e^{i(\omega t - kr)} \, dk \approx e^{-i(\omega_{k_0} t - k_0 r)} \cdot \Phi(r, t)$$

несущая волна — огибающая волна

$$k = \frac{p}{\hbar}, \quad E = \hbar \omega$$



$$V_{гр.} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{p}{m}$$

$$v_{фазов} = \frac{\omega}{k}$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda_{де-Бр}} = \frac{p}{\hbar} \Rightarrow \lambda_{де Бройля} = \frac{2\pi\hbar}{p}$$

$$\lambda = \sqrt{\frac{150}{V}} \text{ Å}, \quad V = эВ$$

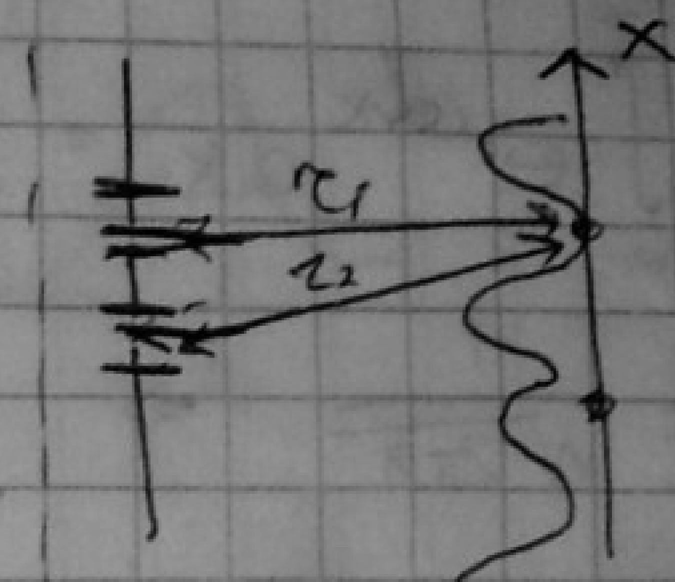
$$\lambda \sim 12 \text{ Å}$$

Статистическое истолкование

$\Psi(x)$ — волнов. ф-ия (М. Борн)

1. Принц. суперпозиции

2. Интерференция Юнга



$$\Psi(x) = C_1 e^{i(Et-kr_1)} +$$
$$+ C_2 e^{i(Et-kr_2)}$$

Интенсивность волны $|\Psi(x)|^2$ (в оптике)

$$|\Psi(x)|^2 = C_1^2 + C_2^2 + 2C_1C_2\, \hat{i}\,(k(r_1 - r_2) = \rho(x) -$$

— плотн. вер. найти частицу в (.) x.

$\Psi(x)$ — амплитуда вероятности

$$\Psi_{\text{де Бройля}}(x,t) = A\cdot e^{-i(\omega t - \vec{p}\cdot\vec{r})}$$

$$\rho_{\text{дебройля}} = |\Psi_{\text{дебр.}}|^2 = A^2$$

$$|\Psi(x)|^2 = \rho(x)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 1$$

$$\Psi_p = Ae^{iP_x\cdot x}$$

$$\Psi_{p'} = Ae^{iP'_x\cdot x}$$

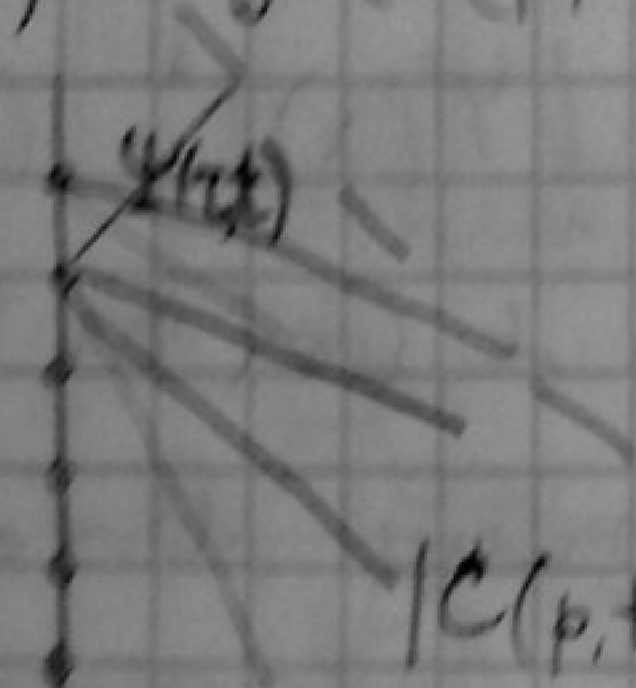
$$A^2\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\frac{x}{\hbar}(P_x - P'_x)}dx = 0, \quad P \neq P'$$

$$= \infty, \quad P = P'$$

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\alpha x}\,dx = \delta(\alpha)$$

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \Rightarrow \int = \delta(p_x - p'_x)$$

$$\Psi(\vec{r},t) = \int C(\vec{p},t)\cdot e^{-i(Et-(\vec{p},\vec{r}))}\cdot\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\,dp_x\,dp_y\,dp_z$$



p - СВ

$|C(p,t)|^2$ - распред. p - СВ

волнов. ф-ия сост. как ф-ия коорд.

$$C(p,t) = \int \Psi(\vec{r},t)\, e^{i(Et-(\vec{p},\vec{r}))}\cdot\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\,dx\,dy\,dz$$

т.е. $C(p,t)$ - амплитуда вероятности импульса p

$\Psi(x,t)$ - волнов. ф-ия в коорд. представ.

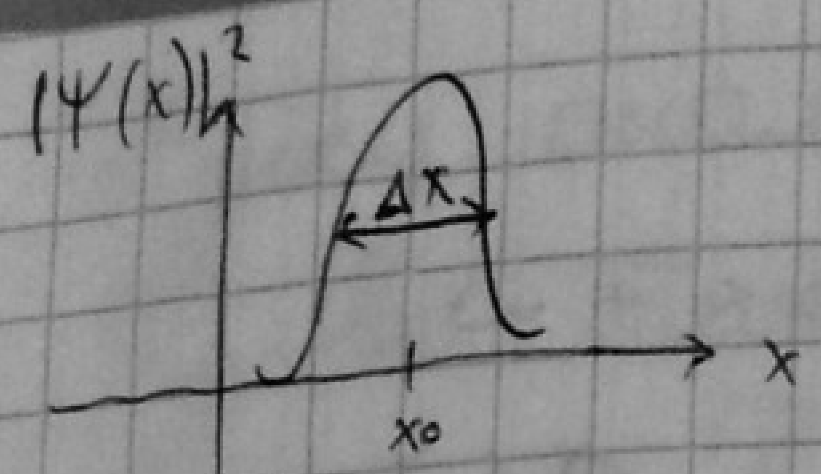
$C(p,t)$ - волнов. ф-ия в импульсном предст.

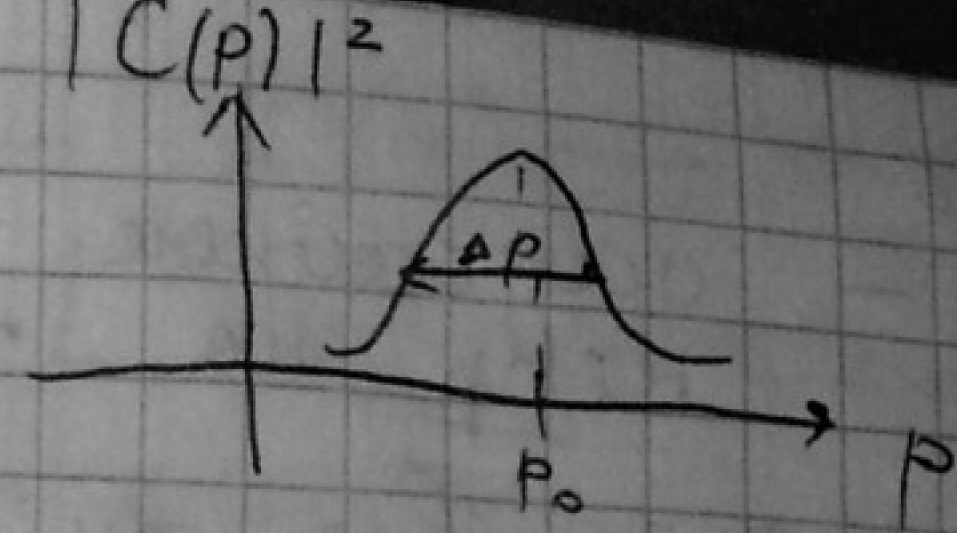
X - СВ, P - СВ

$\rho_p(p) = |C(p)|^2$

$\rho_x(x) = |\Psi(x)|^2$

$$\int |C(p)|^2\,dp_x\,dp_y\,dp_z \overset{?}{=} \int |\Psi(x)|^2\,dx\,dy\,dz = 1$$





$\Delta x \sim \Delta p \Rightarrow$: $\Delta x \cdot \Delta p > \frac{\hbar}{2}$ – соотн. неопред.

$x \quad |\psi(t)|^2$

$$\int x|\psi(x)|^2 dx = \overline{x} = \int \psi^*(x) \cdot x \cdot \psi(x) \cdot dx$$

$p \quad |C(p)|^2$

$$\int p|C(p)|^2 dp = \overline{p} = \int C^*(p) \cdot p \cdot C(p) dp =$$

ПЕРЕПИСАТЬ
В КООРДИНАТНОМ
ПРЕДСТАВЛЕНИИ

?

$$= \int \psi^*(x) \cdot \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi(x) dx$$

6.04 X, P — случайные
непр. на $-\infty < X, P < +\infty$

амплитуды вер-ти: $\Psi(x)$ $C(p)$
волнов. ф-ии
в коорд. или импульсном
представлении

$\rho_x(x) = |\Psi(x)|^2$ — плотн. вер. СВ – X
$\rho_p(p) = |C(p)|^2$ — плотн. вер. СВ – P

$$\overline{X} = \int dX \cdot \rho(x) = \int dx\, \Psi^*(x) \cdot X \cdot \Psi(x)$$

$$\overline{P} = \int dp\, C^*(p) \cdot p \cdot C(p) =$$

$$= \int \Psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi(x)\, dx$$

$$p \to -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

Мех. величины изображаются операторами
(н-р в координатном представлении);

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

$$\begin{cases} \hat{x}\Psi(x) = x \cdot \Psi(x) \\ \hat{p}\Psi(x) = -i\hbar \dfrac{\partial}{\partial x}\Psi(x) \end{cases}$$

Функц. анализ Если $\Psi(x) \xrightarrow[x\to\infty]{} 0$, то $\Psi(x) \in L^2$

1. Пр-во Гильберта $L^2(x)$ $\int |\Psi(x)|^2 dx < \infty$

2. Скалярное Произвед. $(\Psi, f) = \int \Psi^*(x) f(x) dx$

3. $\|\Psi\| = \sqrt{(\Psi,\Psi)}$

4. ОНС (ортонорм. с-ма) $\int \Psi_k^*(x) \varphi_m(x) dx = \delta_{k,m}$

5. $\int \varphi_p^*(x) \varphi_{p'}(x) dx = \delta(p-p')$

$\Delta\hat{x}$, $\Delta\hat{p}$ – оператор отклонения от среднего

$\Delta\hat{x} = \hat{x} - \bar{x}$, $\Delta\hat{p} = \hat{p} - \bar{p}$

$(\Delta\hat{p})^2 = (\hat{p} - \bar{p})^2$

$(\Delta\hat{x})^2 = (\hat{x} - \bar{x})^2$

$\hat{A}$ – произв. оператор $\Delta\hat{A} = \hat{A} - \bar{A}$

$\exists$? бездесперсион. сост. кванов. с-мы ???

$\hat{A}\varphi_A = A \cdot \varphi_A$ с гранич. услов.

Если $\varphi \in L^2 \Rightarrow A$ – счет. множ.

A_n, $n = 0, 1, \ldots$

Проверка сост. φ_A – бездисперсионное

$\bar{A} = (\varphi_A, \hat{A}\varphi_A) = (\varphi_A, A\varphi_A) = A(\varphi_A, \varphi_A) = A$

в сост. φ_A

Если бы число было умнож. на левый вектор, то оно вынеслось бы с сопряжением

$\overline{\hat{A}} = A$

$\Delta\hat{A} = \hat{A} - \overline{A}$

$\overline{(\Delta\hat{A})^2} = \overline{(\hat{A} - A)^2} = 0$

Одновременное измерение двух физич. величин.

$\hat{x}, \hat{p}$

$\Delta x \cdot \Delta p \geqslant \left(\frac{\hbar}{2}\right) \quad \Rightarrow \hbar = 1$

$0 \leqslant \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \xi \cdot x \cdot \Psi(x) + \frac{d}{dx}\Psi(x) \right|^2 dx =$

$= \xi^2 \int x^2 \Psi^* \Psi dx + \int \frac{d}{dx}\Psi^*(x) \cdot \frac{d}{dx}\Psi dx + \xi \cdot$ $\quad = \overline{p}^2$

$\cdot \underbrace{\left(\int x \psi^* \frac{d}{dx} \Psi dx + \int x \Psi \frac{d}{dx} \psi^* dx \right)}_{= F}$

$F = \int x \frac{d}{dx}(\Psi^* \Psi) dx = \underbrace{x \Psi^* \Psi}_{\to 0} \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{\psi \Psi^* dx}_{= 1} =$

$= \xi^2 \overline{x}^2$ будем считать, что $\overline{x} \neq 0$, $\overline{p} \neq 0$

$0 \leqslant \xi^2 \cdot \overline{x^2} + \overline{p^2} - \xi$

$0 < \overline{\Delta x^2} + \overline{\Delta p^2} - \xi$

$\Rightarrow \overline{\Delta p^2} \cdot \overline{\Delta x^2} \geq \frac{1}{4} = \frac{\hbar^2}{4} \quad \forall\ \Psi(x)$

т. е. Это соотн. неопр. коорд. - импульс

Общие условия невозможности одноврем. измерения пары величин.

Т1. Если два опер. $\hat{L}$ и $\hat{M}$ имеют общую с-му собств. ф-ий, то эти операторы перестановочны (коммутируют)

$\hat{L} \cdot \hat{M} = \hat{M}\hat{L} \Rightarrow \hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L} = 0$

Т2. Если пара операторов перестановочна $\Rightarrow$

$\Rightarrow$ имеется набор общих соб. ф-ий

Следствие: $\hat{L}, \hat{M}$ - перестанов. $\Rightarrow$ одновр. точно измер. $\hat{M}$ и $\hat{L}$. Если $\hat{L}\hat{M} \neq \hat{M}\hat{L} \Rightarrow$ у них нет общ. СФ и при их измерении всегда будет получ. разброс

Обознач. П. Дирака

вектор состояния (кет - вектор) - $|\Psi>$ (столбец)

$|\Psi> \alpha + |\varphi> \beta + \ldots$

вектор представления (бра - вектор) - $<\Psi|$ (строка)

$\langle L_m | \Psi \rangle = (L_m, \Psi)$ — вектор сост. в L-представ

$\hat{L} | L_m \rangle = L_m | L_n \rangle$

$\uparrow$ базис

$\langle L_m |$

$\uparrow$ ко-базис (стоят в скал. пр-ии левее запятой)

$\langle x, \Psi \rangle = \Psi(x)$

Разложение единицы

$$\sum_{m=0}^{\infty} \underbrace{| L_m \rangle \langle L_m |}_{\text{матрица}} = \hat{I}$$

Опер. МКД

$$\hat{M} = [\vec{r} \times \hat{\vec{p}}]$$

13.04 $\hat{x} \Phi(x) = x \cdot \Phi(x)$

$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, $\hat{p} \Phi(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Phi(x)$

Д/З !

$$[\hat{x}, \hat{p}] \overset{?}{=} i\hbar$$

Алгебра операторов Гейзенберга - Вейля

SU(2)

3 образующие: $\hbar = 1$

$\hat{M}_x \quad [\hat{M}_x, \hat{M}_y] = i\hat{M}_z$

$\hat{M}_y \quad [\hat{M}_z, \hat{M}_x] = i\hat{M}_y$

$M_z \quad [\hat{M}_y, \hat{M}_z] = i\hat{M}_x$

106235

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

$[\hat{M}^2, \hat{M}_x] = [\hat{M}^2, \hat{M}_z] = [\hat{M}^2, \hat{M}_y] = 0$ Д/З

$[M_x^2 + M_y^2 + M_z^2, M_z] = [M_x^2, M_z]^{\mathrm{I}} + [M_y^2, M_z]^{\mathrm{II}}$

$\mathrm{I}: [M_x^2, M_z] = M_x \cdot \underbrace{M_x \cdot M_z} - M_z \cdot M_x \cdot M_x = -iM_yM_x - iM_xM_y$

$= M_x(M_zM_x - iM_y) = \underbrace{M_xM_z}M_x - M_xiM_y =$

$= (M_zM_x - iM_y)M_x - iM_xM_y =$

$= M_z \cdot M_x \cdot M_x - iM_yM_x - iM_xM_y ~~- M_z \cdot M_xM_x~~$

$[M_y^2, M_z] \overset{?}{=} iM_yM_x + iM_xM_y$ Д/З!

$M^2|l,m\rangle = l(l+1)|l,m\rangle$ общая собств. ф-ция

l, m – квант. числа, помеч. факт перестанов.

$M_z|l,m\rangle = m|l,m\rangle \qquad l \geq 0$, т.к. M^2

$M^+ = M_x + iM_y$

$M^- = M_x - iM_y$

M_z

l, m – квант. числа или функции сост.

Д/з $[M^+, M^-] \overset{?}{=} 2 M_z$

$[M_z, M^\pm] = \pm M^\pm$

$M^2 = M^+M^- - M_z + M_z^2 = M^-M^+ + M_z + M_z^2$

$\frac{M^+ + M^-}{2} = M_x$ $\qquad$ $M_z M^- = M^- M_z - M^-$

$\frac{M^+ - M^-}{2i} = M_y$

$M_x^2 + M_y^2 = \frac{1}{4}\left(M^{+2} + M^{-2} + M^+M^- + M^-M^+ - \right.$
$\left. - \left(M^{+2} + M^{-2} - M^+M^- - M^-M^+\right)\right) = \frac{1}{2}(M^+M^- + M^-M^+)$
$= \frac{1}{2}(M^+M^- + M^+M^- - 2M_z) =$
$= \frac{1}{2}(M^-M^+ + M^-M^+ + 2M_z)$

Д/з ! $[M^2, M^+] \overset{?}{=} [M^2, M^-] \overset{?}{=} 0$

Спектр операторов M^2, M_z
(нормиров. реш. (т.е. у которых квадрат модуля конечен.))

$\hat{M}^-|l,m\rangle = |\Phi\rangle$

M^2 : $M^2 M^-|l,m\rangle = M^2|\Phi\rangle$

$\parallel$

$M^- M^2|l,m\rangle = M^- l(l+1)|l,m\rangle$

$M_z M^- |l,m\rangle = M_z|\varphi\rangle$

$\Rightarrow (M^- M_z - M^-)|l,m\rangle = M^- m|l,m\rangle - M^-|l,m\rangle =$

$= (m-1)|\varphi\rangle$

$|\varphi\rangle = C \cdot |l, m-1\rangle$ $\qquad (M^-)^+ = M^+$

$\quad \| \qquad ?$

$M^-|l,m\rangle$

$(M^-|l,m\rangle)^* = \langle l,m|(M^-)^+$

$\langle\varphi|\varphi\rangle = \langle l,m|M^+M^-|l,m\rangle = l(l+1)+m-m^2 =$

$\underline{M^+M^-} = \underline{\hat{M}^2 - \hat{M}_z - M_z^2}$ $\Big\} = (l+m)(l+1-m) \geqslant 0$

Какое бы ни было l, $m_{min} = -l$!

$m = -l$

$M^-|l,-l\rangle = 0$

$M^+|l,m\rangle = |\chi\rangle \overset{?}{=} \overset{\text{коэфф.}}{D}|l, m+1\rangle$, D — ? Д/З !

$\langle\chi|\chi\rangle = (l-m, l+m+1)$, $m_{max} = l$

$M^+|l, l\rangle = 0$

$-l \overset{\text{ч/з единицу}}{\leqslant} m \leqslant l \Rightarrow$ разн. знач. $m = 2l+1$

$M^{+(k)}|(l,-l\rangle = (?)|l,-l+k\rangle$

Орбитальный момент

(1а) Реализация ($\overset{\text{фиксир.}}{\text{индекс}}$ представ) $\langle \overset{\text{представ.}}{\chi} | \psi \rangle$

Момент количества движения (МКД) сост. коорд. представ.

$x, y, z \longleftrightarrow r, \theta, \varphi$

В классике : $\vec{L} = [\vec{r} \times \vec{p}]$, $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$

В квант. мех. : $\hat{\vec{M}} = [\vec{r} \times \hat{\vec{p}}] =$

$= [\vec{r} \times (-i\hbar)\vec{\nabla}]$

$$\begin{cases} M_x = \hat{p}_z \cdot \hat{y} - \hat{p}_y \cdot \hat{z} \\ \dots \end{cases}$$

Проверить алгебру $su(2)$

$\langle \vec{r} | \varphi \rangle = \varphi(\vec{r})$

$$\boxed{\begin{aligned} y p_z - z \cdot p_y &= M_x \\ x p_y - y p_x &= M_z \\ z p_x - x p_z &= M_y \end{aligned}}$$

$y'' = \delta(x)$

$y(x) = ax + b + cx\,\theta(x)$

$y'' = 0$

$y = ax + b$

$y' = \theta(x)$

$\int \theta(x) = x \cdot \theta(x)$

$((x \cdot \theta(x))', \varphi) =$

$-(x \cdot \theta(x), \varphi') =$

$-\int x \cdot \theta(x) \cdot \varphi' dx$

$$\begin{cases} M^{\pm} = e^{\pm i\varphi}\left(\pm \dfrac{\partial}{\partial\theta} + i\,\mathrm{ctg}\,\theta \cdot \dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ M_z = -i\dfrac{\partial}{\partial\varphi} \quad (\hbar = 1) \end{cases}$$

перестановка?

$$\hat{M}^2 = -\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\cdot\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)$$

$M^2 Y_{l,m}(\theta,\varphi) = l(l+1) Y_{l,m}(\theta,\varphi)$

сферическая функция

для МКД (орбитальный момент)

$l = 0, 1, 2, \ldots$

$M_z Y_{l,m}(\theta,\varphi) = m Y_{l,m}(\theta,\varphi)$

m - целое, $-l \le m \le l$

14.04

$\varphi(\varphi, \theta)$

$M^{\pm} = e^{\pm i\varphi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\,ctg\theta\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$ $\qquad \hbar = 1$

$(\varphi, \chi) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta\, \varphi^*(\theta,\varphi)\cdot\chi(\theta,\varphi)$, $\|\varphi\|^2 < \infty$

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

$M_z = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}$

$$\begin{cases} M^2 Y_{l,m}(\theta,\varphi) = l(l+1) Y_{l,m}(\theta,\varphi) \\ M_z Y_{l,m}(\theta,\varphi) = m Y_{l,m}(\theta,\varphi) \end{cases}$$ $l = 0, 1, 2 \ldots$, $-l \le m \le l$

$m = l \qquad Y_{l,l}(\theta,\varphi),\ Y_{l,l-1}, \ldots Y_{l,-l}$

$M^+ Y_{l,l}(\theta,\varphi) = 0$

$$\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+i\,ctg\theta\cdot\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)Y_{l,l}(\theta,\varphi)=0$$

$$Y_{l,l}(\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{il\varphi}\Theta_{l,l}(\theta)$$

$$\left(\frac{d}{d\theta}-ctg\theta\cdot l\right)\Theta_{l,l}(\theta)=0\ (*)$$

$$\Theta_{l,l}(\theta)=\underbrace{(-i)^l\cdot\sqrt{\frac{(2l+1)!}{2}}\cdot\frac{1}{2^l\cdot l!}}_{\text{нормировка}}\sin^l\theta \quad (+)$$

удовлетв.

$$(M^-)^{l-m}Y_{l,l}(\theta,\varphi)=\sqrt{(2l)!}\sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}Y_{l,m}(\theta,\varphi)$$

1. $l=1$ и проверить что ур-ие $(*)$ имеет решение $(+)$
2. проверить нормировку
3. $l=1,\ m=1$; $l=1,\ m=0$
   $(Y_{1,1},\ Y_{1,0})=0$

1). $$\left(\frac{d}{d\theta}-ctg\theta\right)\underset{\substack{\parallel\\ \sin\theta}}{\Theta_{1,1}(\theta)}=0$$

$$\left(\frac{d}{d\theta}-ctg\theta\right)\sin\theta=0$$

$$\cos\theta-\cos\theta=0$$

2). $$Y_{1,1}=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\varphi}\sqrt{3}\cdot\frac{1}{2}\sin\theta$$

$$(Y_{11},Y_{11})=\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}\sin\theta\,d\theta\cdot\frac{1}{2\pi}3\cdot\frac{1}{4}\sin^2\theta=$$

$$= \cancel{\frac{3}{4}\int_0^{\pi} \frac{1-\cos 2\theta}{2} \sin\theta \, d\theta = \frac{3}{4}\cdot\frac{1}{2}\left(-\cos\theta \Big|_0^{\pi}\right) = \frac{3}{8}\cdot 2} = \frac{3}{4}$$

$$= -\frac{3}{4}\int_0^{\pi} (1-\cos^2\theta)\, d\cos\theta = -\frac{3}{4}\left(\int_0^{\pi} d\cos\theta - \int_0^{\pi} \cos^2\theta \, d\cos\theta\right) =$$

$$= -\frac{3}{4}\left(\cos\theta \Big|_0^{\pi} - \frac{\cos^3\theta}{3}\Big|_0^{\pi}\right) = -\frac{3}{4}\left(-2 + \frac{2}{3}\right) = 1$$

$$M^- = e^{-i\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i \operatorname{ctg}\theta \frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$M^- \sin\theta e^{i\varphi} = e^{-i\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i \operatorname{ctg}\theta \frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \sin\theta e^{i\varphi} =$$

$$= e^{-i\varphi} e^{i\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\sin\theta + i \operatorname{ctg}\theta \, e^{-i\varphi} \cdot \sin\theta \underbrace{\frac{\partial}{\partial\varphi} e^{i\varphi}}_{ie^{i\varphi}} =$$

$$= -\cos\theta + i \cdot \frac{\cos\theta}{\cancel{\sin\theta}} \cancel{\sin\theta}\, e^{-i\varphi} \cdot \frac{\partial}{\partial\varphi} e^{i\varphi} =$$

$$= -\cos\theta + i\cos\theta \cdot i = -2\cos\theta = Y_{1,0}(\theta,\varphi)$$

$\vec{МКД} = [\vec{r} \times \vec{p}]$

$|МКД| = |\vec{r}||\vec{p}| \cdot \sin\alpha$

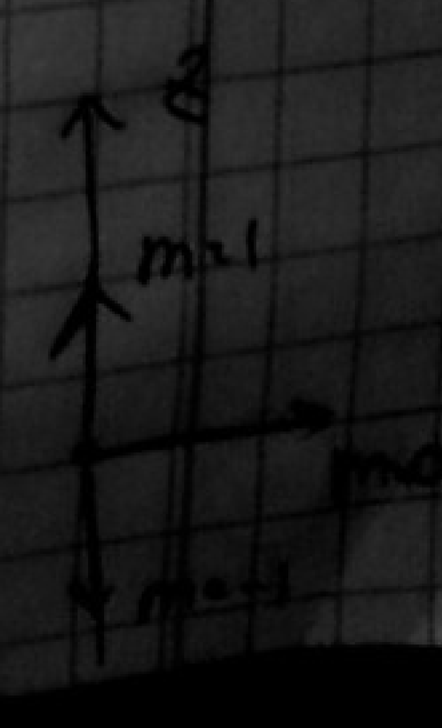
1. $|МКД|^2 \sim \hbar^2 l(l+1)$, $l = 0, 1, \ldots$

2. $\vec{M}_z = |МКД| \cos(\theta)$

$-|МКД| \leq M_z \leq |МКД|$

$M_z = \hbar \cdot m$, $-l \leq m \leq l$

$l=1$



② Матрич. реализация SU(2)

2×2

квадр. матрицы, чтобы опер. м/б СС

$$S_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

д/з

a) S_x, S_y, S_z перестановки?

в) $S^{\pm} = S_x \pm i S_y$

S^-, S^+, S_z — SU(2)

c) $S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 =$

$= S^- S^+ + S_z^2 + S_z =$

$= S^+ S^- + S_z^2 - S_z$ $\quad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

$S^2 Y_{l,m} = l(l+1) Y_{l,m}$

$S_z Y_{l,m} = m Y_{l,m}$ $\quad m = \pm 1/2$

$l(l+1) = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{1}{2} + 1\right)$

$\Rightarrow l = \frac{1}{2} \quad -l \leq m \leq l$

S — МКД спиновый

Реш-ие ур-ия Шредингера для простейших квантовых с-м. 20.04

1. Гармонич. осциллятор (в коорд. представ.)
2. Атом водорода H

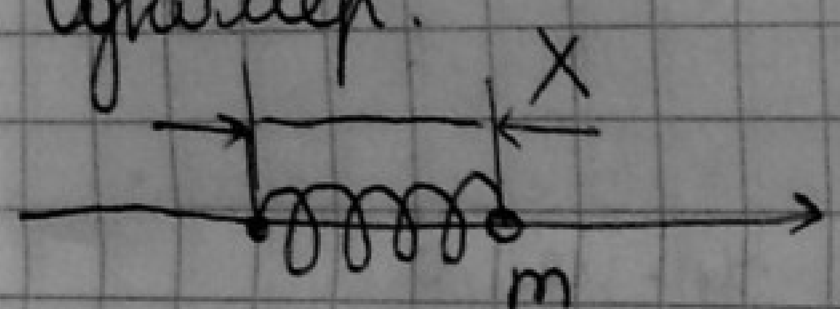
① ~~Обычные~~ дифф. лин. ур-я $2^{\text{го}}$ порядка с ~~оо~~ особенностями $\pm\infty$ в конеч. $(\cdot)$

Гипергеом. ф-ии (ур-ия)

Вырожд. гипергеом. ур-ия

$$\hbar = 1$$

одномер.



$$H(x) = \hat{T}(x) + \hat{U}(x) =$$

$$= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\cdot x^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \hat{H}\Psi(x,t)$$

$$\Psi(x,t) = e^{-iEt}\cdot\Phi(x)$$

$E\Phi(x) = \hat{H}\Phi(x)$ + гр. условия — стац. ур-ие Шредингера

$\Phi_E(x)$ (СФ), E (СЧ) — возможное знач. — ?

полная энергия

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\Phi^*(x)\,\Phi_E(x)\,dx < \infty$$ — условие нормировки

$\Rightarrow \Phi_E^*(x)\,\Phi_E = P(x)$

$\Phi_E(x) \in L^2(-\infty, \infty)$

$\Phi_E(x) \xrightarrow[x\to\pm\infty]{} 0$

Д
А
К
В
И

$$\begin{cases} \left(-\frac{1}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \underbrace{\frac{m\omega^2}{2}x^2}_{\xrightarrow[x\to\pm\infty]{}\infty}\right)\Phi_E(x) = E\cdot\Phi_E(x) \\ \Phi_E(x) \xrightarrow[x\to\pm\infty]{} 0 \end{cases}$$

$x = \frac{X}{x_0}$, x_0 – масштаб коорд.

$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ $\quad [x_0] = $ см

$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$

$\left[\frac{d^2}{dx^2} + (\lambda - x^2)\right]\Phi(x) = 0$ – ур-ие в безразмер. перем.

1. асимптотика ур-ия*:

$\left(\frac{d^2}{dx^2} - x^2\right)\Phi_{асимпт.} = 0$

$\Phi_{асимпт.} \simeq e^{-\frac{x^2}{2}} \xrightarrow[x\to\pm\infty]{} 0$ – приближ. реш. при больших x

$\frac{d^2}{dx^2}\Phi = \left(-xe^{-\frac{x^2}{2}}\right)' = -e^{-\frac{x^2}{2}} + x^2 e^{-\frac{x^2}{2}} \sim x^2 e^{-\frac{x^2}{2}}$

$\Phi(x) = e^{-\frac{x^2}{2}} \cdot \chi(x)$

?

$\chi''(x) - 2x\cdot\chi'(x) + (\lambda - 1)\chi(x) = 0$

2. разложение в ряд Тейлора по "целым" степеням

$$\chi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n = \sum_{m=0} a_{2m} x^{2m} \longrightarrow \sum_m \frac{1}{m!} (x^2)^m \sim$$

$$\sim e^{x^2}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} n(n-1) a_n x^{n-2} - 2x \sum_{n=0}^{\infty} n a_n x^{n-1} +$$

$$+ (\lambda - 1) \sum_n a_n x^n = 0$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} (n+2)(n+1) a_{n+2} x^n + \sum_{n=0}^{\infty} (-2n + \lambda - 1) \cdot$$

$$a_n x^n = 0$$

$n = 0 \quad 2a_2 + (\lambda - 1) a_0 = 0$

$n = 1 \quad 6a_3 + (-2 + \lambda - 1) a_1 = 0$

$n = 2 \quad (2+2)(2+1) a_4 + (-2 \cdot 2 + \lambda - 1) a_2 = 0$

. . . .

$$a_{k+2} = \frac{2k - (\lambda - 1)}{(k+2)(k+1)} a_k \qquad a_0 \neq 0, \ k = 2m, \ m \in \mathbb{Z}$$

$\lambda - ? \quad a_{2m} \xrightarrow[2m \to \infty]{} ?$

$$\varphi(x) = e^{-\frac{x^2}{2}} \chi(x) = e^{\frac{x^2}{2}}$$

$$a_{2m+2} \sim \frac{2 \cdot 2m}{2m \cdot 2m} a_{2m}$$

$$a_{2m+2} \sim \frac{1}{m} a_{2m}$$

$$a_1 = \frac{1}{1} a_0$$

$$a_2 = \frac{1}{2} a_1 = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{1} \cdot a_0$$

$$a_m = \frac{1}{m!} a_0$$

$\exists\ \lambda_n = 2n+1,\ n = 0, 1, \dots$

n – фиксир.

$k = n \qquad a_{n+2} = \dfrac{2n+1-\lambda_n}{(n+2)(n+1)} \cdot a_n$

$a_{n+2} = 0$

$a_{n+4} = 0$

$a_{n+6} = 0$

$$\chi_n(x) = \sum_{k=0}^{n} (a_k x^k) \xrightarrow[x \to \pm\infty]{} x^n$$

$$\varphi_n(x) = e^{-\frac{x^2}{2}} x^n \xrightarrow[x \to \pm\infty]{} 0$$

$$E_n = \frac{\hbar\omega \cdot \lambda_n}{2} = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

$n = 0, 1, 2, \dots$ – номер уровня энергии

$E_0 = \dfrac{\hbar\omega}{2} \Rightarrow$ энергия основ. сост., т.к. $\neq 0 \Rightarrow$ осц. пост. наход. в движении

Полином Эрмита: $H_n(x) \cancel{= (-1)^n \frac{e}{\sqrt{}}}$

$\cancel{\parallel \ \chi_n(x)}$

$$\chi_n(x) = H_n(x) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n \cdot n! \cdot \sqrt{\pi}}}\, e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \qquad (*)$$

*) проверить, что ЭТО полином???

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_n^*(x) H_m(x)\, dx = \delta_{n,m}$$

2), Док-ть, что (*) – решение

$$H_n'' - 2x H_n' + 2 \cdot n \cdot H_n = 0$$

$$\left(\frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}} + 2x \frac{d^n}{dx^n} + 2n \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} \right) e^{-x^2}$$

$n = 0$ $\quad H_0$ – реш.

$n = k$ вып. $\quad H_k$ – реш.

$n = k+1$

② Атом H

(ССК – сферич. с-ма коорд.)

$\Psi(x, y, z)$ – эл. волнов. ф-ия

27.04

$\circ \vec{e}$

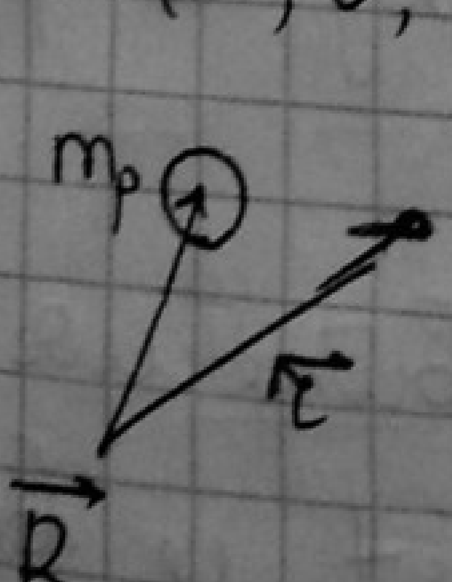
$\circ \vec{p}$

$M_p \gg m_e$

$2000 m \sim M_p$

1. покоящийся протон $M_p \to \infty$

$$H(r, \theta, \varphi) = \hat{T} + \hat{V}(r)$$



$\vec{R} = 0$

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$$

$E > 0$ (·) пов. отсутств.

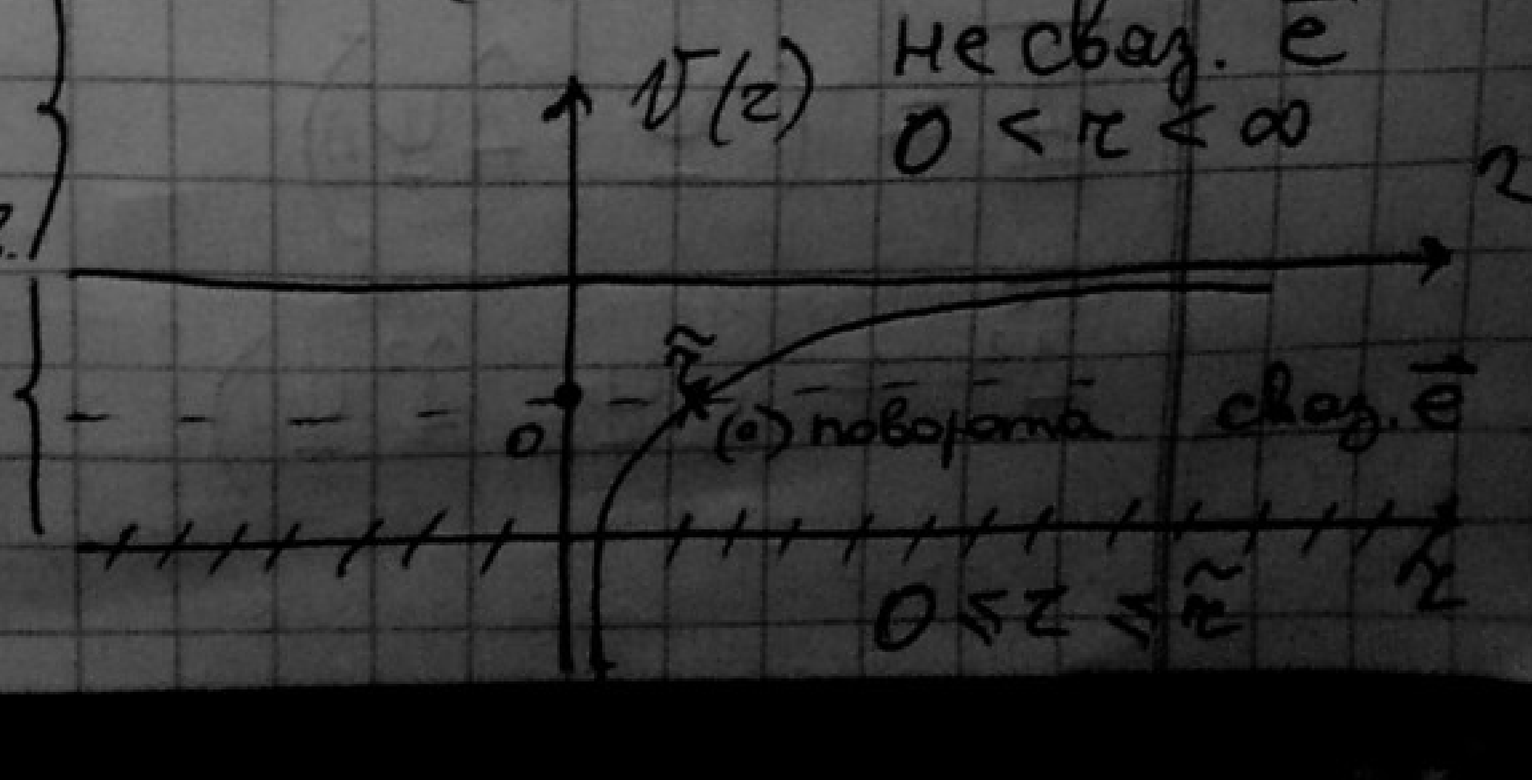
не связ. $\vec{e}$

$0 < r < \infty$

$E < 0$

$E = \frac{Ze^2}{r}$

$\tilde{r} = \frac{Ze^2}{E}$



Атом H связ. движение $E<0$

С (·) зрения классики атом не устойчив, т.е. $r \to 0$; парадокс

$$\Psi_E(r,\theta,\varphi)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = H\Psi(\vec{r},t) \qquad \hbar = 1$$

$$\Psi(\vec{r},t) = e^{-iEt}\cdot\Psi_E(r,\theta,\varphi)$$

$$H(r,\theta,\varphi)\Psi_E(r,\theta,\varphi) = E\Psi_E(r,\theta,\varphi)$$

Интеграл движения

(Сохр. во времени физич. величин)

$\hat{A}$: чтобы все его моменты $(\hat{A}, \hat{A}^2, \ldots)$ не менялись бы во времени

$$\begin{cases} i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t) = \hat{H}\Psi(t) \\ \Psi(t)|_0 = \Psi_0 \end{cases}$$

$\hat{H}$ – определяет динамику во времени

$$\begin{cases} \overline{\hat{A}} = (\Psi, \hat{A}\Psi(t)) \\ \overline{\hat{A}^2} = (\Psi, \hat{A}^2\Psi(t)) \\ \ldots \end{cases}$$

для инт. движения $\hat{A}(t)$ – const и все ост. моменты тоже

$\hat{A} \to \dot{\hat{A}}$ — скорость изменения опер. $\hat{A}$

$$(\Psi(t), \hat{A}\Psi(t)) = \overline{\hat{A}}(t)$$

$$\dot{\overline{\hat{A}(t)}} = \overline{\dot{\hat{A}}} = (\Psi(t), \dot{\hat{A}}\Psi(t))$$

$$\dot{\overline{(\Psi(t), \hat{A}\Psi(t))}} = \underbrace{(\Psi(t), \dot{\hat{A}}\Psi(t))}$$

$$i\dot{\Psi} = H\Psi$$

$$-i\dot{\Psi}^* = H\Psi^*$$

$$(\dot{\Psi}(t), A\Psi) + (\Psi, A\dot{\Psi}) = \cancel{(iH\Psi}$$

$$= \int \dot{\Psi}^* A\Psi\, dx + \int \Psi^* A\dot{\Psi}\, dx = \int iH\Psi^* A\Psi\, dx +$$

$$+ \int \Psi^* A(-i)H\Psi\, dx = i\int \Psi^* (HA - AH)\Psi\, dx =$$

в силу эрмитовости H

$$= \underbrace{\int \Psi^* i[H, A]\Psi\, dx} = \int \Psi^* \dot{A}\Psi\, dx$$

$\dot{A} = i[\hat{H}, \hat{A}]$ — ур-ие для A — ур-ие Гейзенберга

$A = A(t)$

Если $H = H(t)$, то вырат. (+) НЕВЕРНО

$A(0) = A$

$A(t) = e^{iHt} A e^{-iHt}$

очевидно : $\frac{d}{dt} e^{iHt} \overset{??}{=} iHe^{iHt}$ (+)

$$(\Psi(t), A\Psi(t)) = \overline{\hat{A}(t)}$$

$$\begin{cases} i\dot{\Psi}(t) = H\Psi(t) \\ \Psi(0) = \Psi_0 \end{cases}$$

унитарный

оператор развития $\Psi(t) = e^{-iHt}\Psi(0)$

подход Шредин. $\Psi(t), A$

$$\overline{\hat{A}(t)} = (\Psi(t), A\Psi(t)) = (e^{-iHt}\Psi_0, Ae^{-iHt}\Psi_0) =$$

$(e^{-iHt})^+ = e^{iHt}$ (унитарный)

$H^+ = H$

$$= (\Psi_0, \underline{e^{iHt} A e^{-iHt}} \Psi_0)$$

$(A\Psi, \varphi) = (\Psi, A^+\varphi)$

подход Гейзенберга $\Psi_0, A(t)$

Инт. движ.

$A(t) = A = const \Rightarrow \dot{A} = 0 \Rightarrow [H, A] = 0$

Инт. движ. перестановочны с H

Интегралы дв-ия для атома H

$$\hat{H} = \hat{T} - \frac{ze^2}{r} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{ze^2}{r} =$$

$$= \underbrace{\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta_r}_{\text{радиальная часть опер. Лапл. (произв. по } r)} + \underbrace{\frac{\hat{M}^2(\theta, \varphi)}{2m \cdot r^2}}_{\text{угловая часть (произв. } \theta \text{ и } \varphi)} - \frac{ze^2}{r}$$

$$T_r + T_{\theta,\varphi}$$

кин. энерг. радиальн. — кин. эн. углов.

$$[\hat{H}, \hat{A}] = 0$$

$$[H, \hat{M}^2] = 0 \rightarrow \begin{cases}[\hat{M}^2, \hat{M}_z] = 0 \\ [\hat{H}, \hat{M}_z] = 0\end{cases}$$

инт. дв-ия $\hat{M}^2$ и $\hat{M}_z$ — углов. пер. отделяютая от радиальн.

$$\begin{cases}\hat{H}\Psi_{E,M,m}(r,\theta,\varphi) = E\Psi_{E,M,m}(r,\theta,\varphi) \\ \hat{M}\Psi_{E,M,m} = M(M+1)\Psi_{E,M,m} \\ \hat{M}_z\Psi_{E,M,m} = \underset{\uparrow \text{проекция}}{m}\Psi_{E,M,m}\end{cases}$$

$$\Psi_{E,M,m}(r,\theta,\varphi) = R_{E,M}(r)\cdot Y_{M,m}(\theta,\varphi)$$

Рад. уравнение

$$\left(-\frac{1}{2m}\Delta_r + \frac{M(M+1)}{2m\cdot r^2} - \frac{Ze^2}{r}\right)R_{E,M}(r) = E R_{E,M}(r)$$

m — масса; $E < 0$ — пока произвольная

$$\Delta_r = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}$$

$$R_{E,M}(r) = \frac{\Psi_{E,M}(r)}{r}$$

$$\Delta_r\frac{\Psi_{E,M}}{r} = \frac{1}{r}\ddot{\Psi}_{E,M}(r)$$

$$\frac{\partial}{\partial r}\frac{\Psi_{E,M}}{r} = -\frac{1}{r^2}\Psi_{EM} + \frac{\dot{\Psi}}{r}$$

$$r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} = -\psi_{E,M} + r\dot{\psi}_{E,M}$$

$$\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \psi_{E,M} = \cancel{-\dot{\psi}_{E,M} + \dot{\psi}_{E,M}} + r\ddot{\psi}_{E,M}$$

$$(VV)\quad \left(-\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{M(M+1)}{2m r^2} - \frac{Ze^2}{r}\right)\psi_{E,M}(r) = E\psi_{E,M}(r)$$

1) $r \longrightarrow \infty$

$$-\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\psi = E\psi$$

$\psi = e^{\alpha r}$ асимпт-ка ∞: $e^{-\sqrt{-2mE}\cdot r}$

$$-\frac{1}{2m}\alpha^2 = E$$

$$\alpha^2 = -2mE$$

$$\alpha = \pm\sqrt{-2mE}$$

2). $r \to 0$

$$-\frac{\partial^2}{\partial r^2}\psi + \frac{M(M+1)}{r^2}\psi = 0 \qquad r^{M-1}$$

$$\psi = r^\beta$$

$$-\beta(\beta-1) r^{\beta-2} + M(M+1)\cancel{\beta} r^{\beta-2} = 0$$

$$-\beta^2 + \beta + M(M+1) = 0$$

$$\beta^2 - \beta - M(M+1) = 0$$

$$\beta_{1,2} = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} + M^2 + M} = \frac{1}{2} \pm \left(M + \frac{1}{2}\right) = \left[\begin{array}{l} M+1 \\ -M \end{array}\right.$$

$$\psi_{E,M}(r) = e^{-\sqrt{-2mE}\cdot r} \cdot r^{M+1} \cdot U_{E,M}(r) \quad (\text{V})$$

(раст. не быстр., чем экспот. множ.)

$$(\text{V}) \xrightarrow{b} (\text{VV})$$

3) $r \to \rho = \dfrac{r}{a}$, $a = \dfrac{\hbar^2}{m \cdot e^2} \sim 0{,}5 \cdot 10^{-8}$ см

характ. размер атома

$\alpha = \sqrt{-\mathcal{E}}$

$E \to \mathcal{E} = \dfrac{E}{\hat{E}_1}$, $\hat{E}_1 = \dfrac{e^2}{2a} \sim 13{,}55$ эВ

характ. масштаб энергии $\bar{e}$

$$R_{E,l} = e^{-\alpha \cdot \rho} \cdot \frac{1}{\rho} f(\rho)$$

здесь все в безразмерных переменных!

$$f(\rho) = \rho^{l+1} \sum_{\nu=0} a_\nu \cdot \rho^\nu$$

$$f'' - 2\alpha f' + \left(\frac{2z}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) f = 0$$

z – заряд ядра, число $\vec{p}$ в ядре

рекурр. соотнош. для a_ν:

$$a_{\nu+1} = \frac{2 \cdot \alpha(\nu + l + 1) - 2z}{(\nu + l + 2)(\nu + l + 1) - l(l+1)} a_\nu \,, \quad \nu = 0, 1, 2 \ldots, \quad l = 0, 1, 2 \ldots$$

найдем услов., при которых ряд обрывается на шаге $\nu = n_r$ – радиальн. квант. число

$$2\alpha(n_r + l + 1) - 2z = 0$$

$\alpha = \dfrac{z}{n_r + l + 1}$, $n_r + l + 1 = n$ – главное квантовое число т.к. $n_r = 0, 1, \dots$, то $n = l+1, l+2, \dots$

(l – орбит. число кол-во движения)

$$\alpha = \frac{Z}{n}, \quad -\varepsilon = \frac{Z^2}{n^2}$$

$$E_n = -\widehat{E}_1 \cdot \frac{Z^2}{n^2}$$

$$e^{-\sqrt{\frac{E_n}{-\widehat{E}_1}}\,\frac{r}{a}} = e^{-\frac{Z}{n}\frac{r}{a}}$$

$$\xi = \frac{2\cdot Z}{n}\cdot \rho$$

$$R_{n,l}(\xi) = N_{n,l}\, e^{-\frac{1}{2}\xi}\cdot \xi^{l}\cdot \underbrace{L^{2l+1}_{n+l}(\xi)}$$

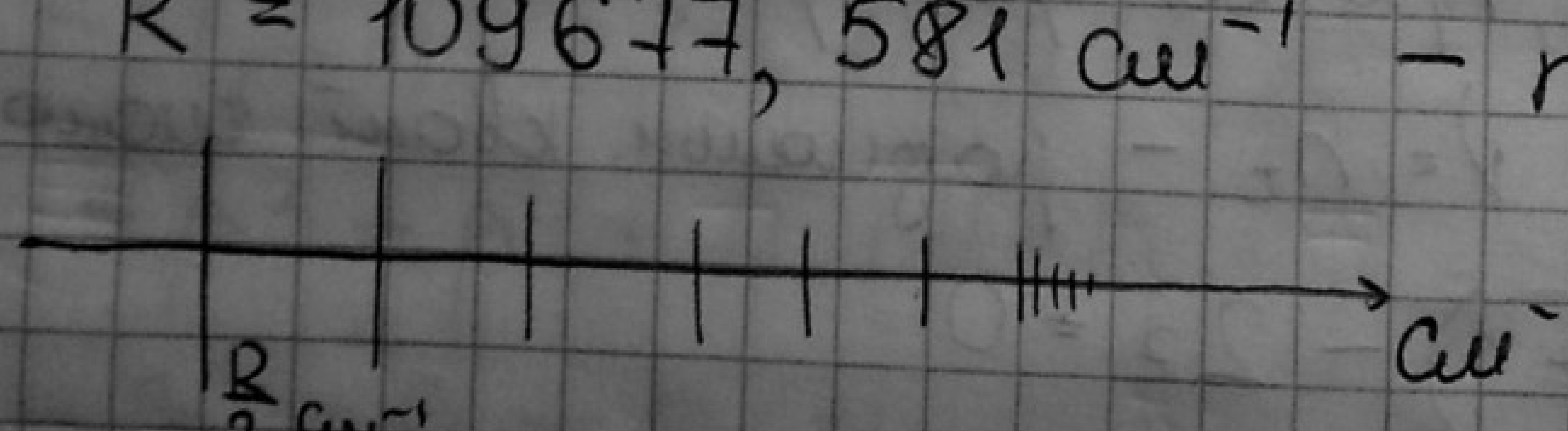
Полином Лагерра: $L_k(\xi) = e^{\xi}\frac{d^k}{d\xi^k}\left(\xi^k\cdot e^{-\xi}\right)$

Обобщ. полином Лагерра: $L^s_k(\xi) = \frac{d^s}{d\xi^s} L_k(\xi)$

$$\left[\frac{1}{\lambda}\right] = см^{-1}$$

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(1 - \frac{1}{n^2}\right), \quad n \in \mathbb{Z}$$

$R = 109677{,}581\ см^{-1}$ – пост. Ридберга



Лайман: $n = 2, 3, \dots$ в УФ

видимая серия

$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right)$, $n = 3, 4, \ldots$ — Бальмер

$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2}\right)$, $n = 4, 5, \ldots$ — Пашен ИК

Сериальный закон

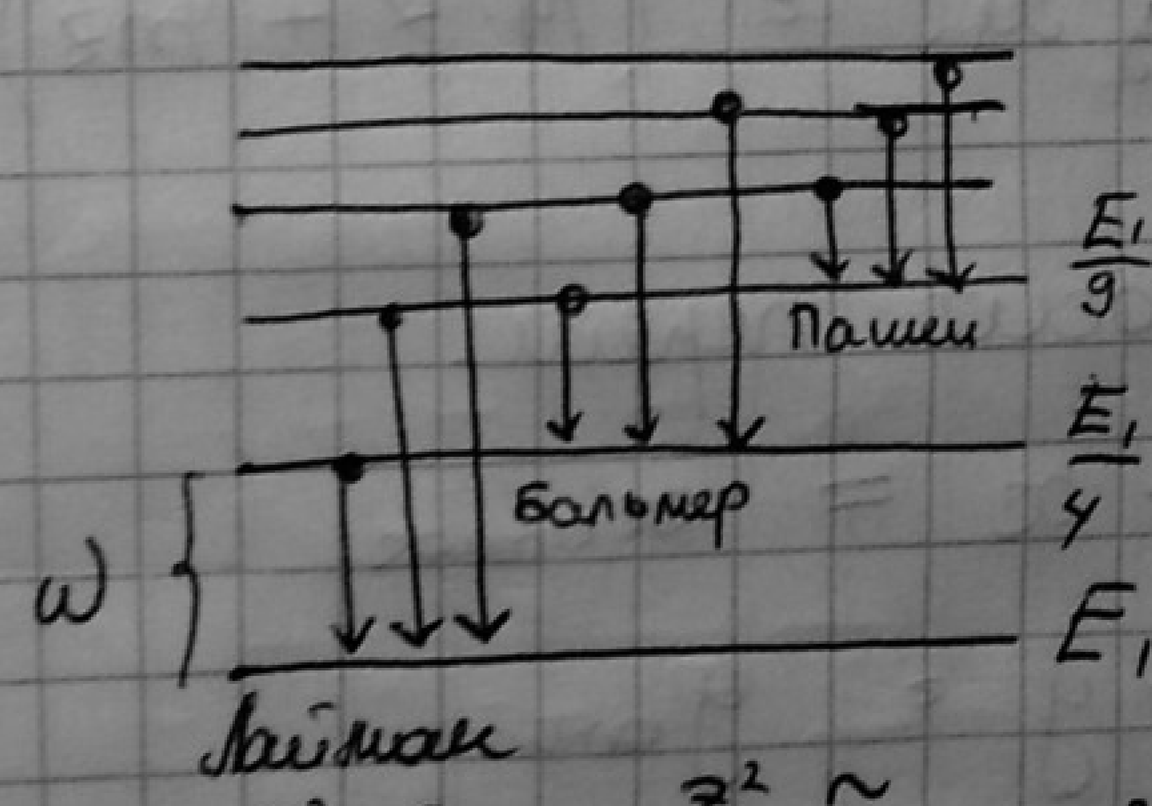
$E_n = -\frac{Z^2}{n^2}\tilde{E}_1$, $n = l+1, l+2, \ldots$; $l = 0, 1, 2 \ldots$

$n_{min} = 1$

$E = 0$

$E_1 = -Z^2\tilde{E}_1$ — min уровень энергии

$E_2 = -\frac{Z^2}{4}\tilde{E}_1$



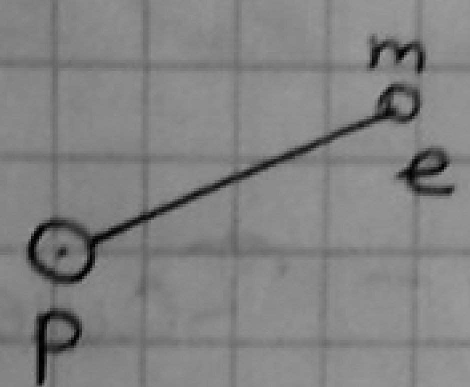
$\omega = E_n - E_{n'}$ $\qquad \omega_2 = -\frac{Z^2}{4}\tilde{E}_1 + \frac{Z^2}{1}\tilde{E}_1 = Z^2\tilde{E}_1\left(1 - \frac{1}{4}\right)$

~~$\omega_n \neq \frac{Z}{n^2}$~~ приведенная масса $\vec{e}$ $\qquad \omega_n = \underbrace{Z^2\tilde{E}_1}_{= R}\left(1 - \frac{1}{n^2}\right)$

$R = \frac{e^4 \cdot \mu^2}{4\pi\hbar^2 \cdot c} \sim 109737{,}40$ см$^{-1}$

Учет конечности массы ядра

масса ядра $\rightarrow M$



$$T_{кин.} = T_{ядра} + T_{\bar{e}} = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{ядра} - \frac{\hbar^2}{2m_{\bar{e}}}\Delta_{\bar{e}} =$$

закон Кулона

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{\hbar^2}{2m_{\bar{e}}}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

коорд.

$$X_{центра\ масс} = (M\cdot X + m\cdot x)/M+m$$

$$Y_{ц.м.} = (M\cdot Y + my)/M+m$$

$$Z_{ц.м.} = (M\cdot Z + mz)/M+m$$

сделать замену перем. → всего 6 перем. и получить

Относит. перем.

$$X - x = x_{относ.}$$

$$Y - y = y_{отн.}$$

$$Z - z = z_{относ.}$$

$$V(r) = -\frac{e^2 Z^2}{r^2}$$ – зависит только от относ.

$$= T_{ц.м.} + T_{относ.} =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2(M+m)}\Delta_{ц.м.} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{отн.}$$

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{M} + \frac{1}{m} \Rightarrow m\mu = \frac{m \cdot M}{M+m} \xrightarrow[M\to\infty]{} m$$

Метод теории возмущений

$$H = H_0 + V\cdot\gamma$$

нуль приближ. точно решена (СВ, СЧ найдены)

„малая добавка", γ – параметр малости

$$H\Psi = E\Psi$$

$\Psi = \Psi_0 + \gamma\cdot\Psi_1 + \gamma^2\Psi_2 + \ldots$ – степ. ряд по целым степеням γ

$$E = E_0 + \gamma E_1 + \gamma^2 E_2 + \ldots$$

$$(H_0 + \gamma V)(\Psi_0 + \gamma\Psi_1 + \ldots) = (E_0 + \gamma E_1 + \ldots)(\Psi_0 + \gamma\Psi_1 + \ldots)$$

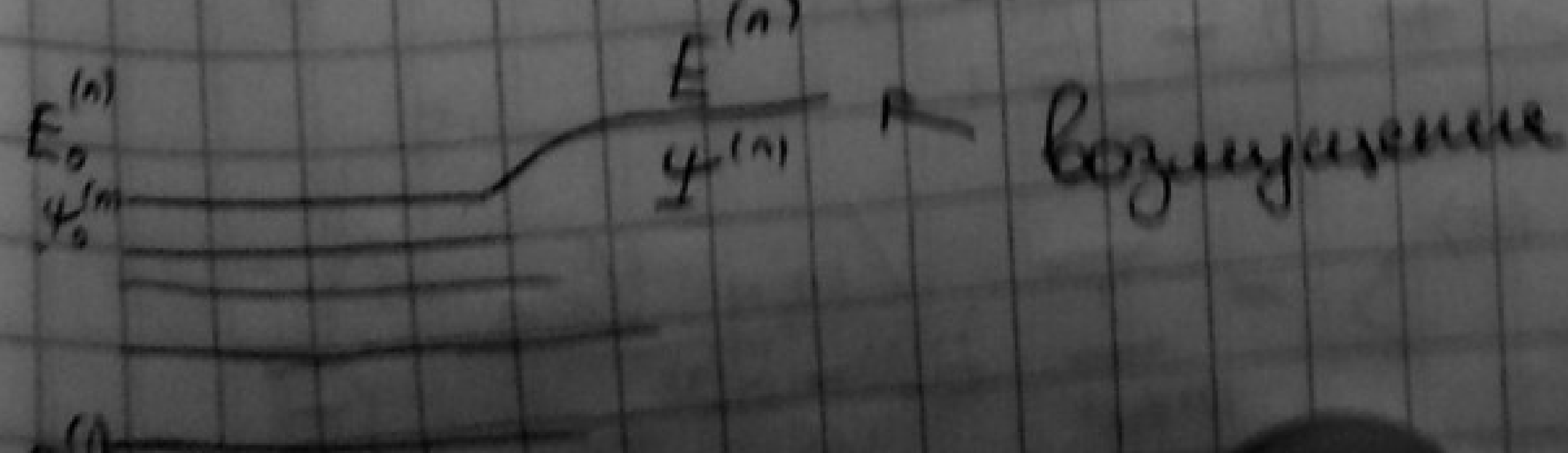
Ур-ие нулевого приближ: $H_0\Psi_0 = E_0\Psi_0$, $\underbrace{\Psi_0 = \Psi_0^{(n)}}_{\text{ОНС}}$, $E_0 = E_0^{(n)}$ – не вырожд.

γ $\langle \Psi_0^{(n)}, \Psi_0^{(m)} \rangle = \delta_{n,m}$

$\gamma \langle \Psi_0^{(n)} |$ $H_0\Psi_1 + V\Psi_0 = E_0\Psi_1 + E_1\cdot\Psi_0$

$\Psi_1 = ?$ E_1 – ?

$\Psi_0 = \Psi_0^{(n)}$ Задача возмущ. собств. вектора и собств. числа n-ого уровня



$$E_0^{(n)}\langle\Psi_0^{(n)}|\Psi_1^{(n)}\rangle + \langle\Psi_0^{(n)}|V|\Psi_0^{(n)}\rangle =$$
$$= E_0^{(n)}\langle\Psi_0^{(n)}|\Psi_1^{(n)}\rangle + E_1^{(n)}\langle\Psi_0^{(n)}|\Psi_0^{(n)}\rangle$$

$E_1^{(n)} = \langle\Psi_0^{(n)}|V|\Psi_0^{(n)}\rangle$ – поправка 1-го порядка

$\Psi_0^{(m)},\ m\neq n$

$$E_0^{(m)}\langle\Psi_0^{(m)}|\Psi_1^{(n)}\rangle + \langle\Psi_0^{(m)}|V|\Psi_0^{(n)}\rangle =$$
$$= E_0^{(n)}\langle\Psi_0^{(m)}|\Psi_1^{(n)}\rangle + E_1^{(n)}\langle\Psi_0^{(m)}|\Psi_0^{(n)}\rangle$$

$$\langle\Psi_0^{(m)}|\Psi_1^{(n)}\rangle = \frac{\langle\Psi_0^{(m)}|V|\Psi_0^{(n)}\rangle = V_{n,m}}{\underbrace{E_0^{(n)}-E_0^{(m)}}_{\neq 0}},\quad m\neq n$$

Крит. применимости теор. возмущения:

$$|V_{n,m}| \ll |E_0^{(n)} - E_0^{(m)}|$$

$$\Psi_1^{(n)} = \sum_{m\neq n}\frac{V_{m,n}}{E_0^{(n)}-E_0^{(m)}}\cdot\Psi_0^{(m)}$$

2. $H_0\Psi_2^{(n)} + V\Psi_1^{(n)} = E_0^{(n)}\Psi_2^{(n)} + E_1^{(n)}\cdot\Psi_1^{(n)} + \underline{E_2^{(n)}}\Psi_0^{(n)}$

$\langle\Psi_0^{(n)}|$ $\quad E_0^{(n)}\langle\Psi_0^{(n)}|\Psi_2^{(n)}\rangle + \langle\Psi_0^{(n)}|V|\Psi_1^{(n)}\rangle =$
$$= E_0^{(n)}\langle\Psi_0^{(n)}|\Psi_2^{(n)}\rangle + 0 + E_2^{(n)}$$

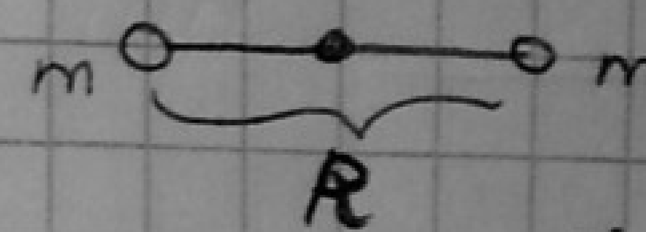
$$E_2^{(n)} = \langle\Psi_0^{(n)}|V|\Psi_1^{(n)}\rangle = \sum_{m\neq n}\frac{V_{m,n}\cdot V_{n,m}}{E_0^{(n)}-E_0^{(m)}} =$$
$$= \sum_{m\neq n}\frac{|V_{m,n}|^2}{E_0^{(n)}-E_0^{(m)}}$$

$$E_2^{(n)} = -\sum_{m\neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_0^{(m)}-E_0^{(n)}}$$

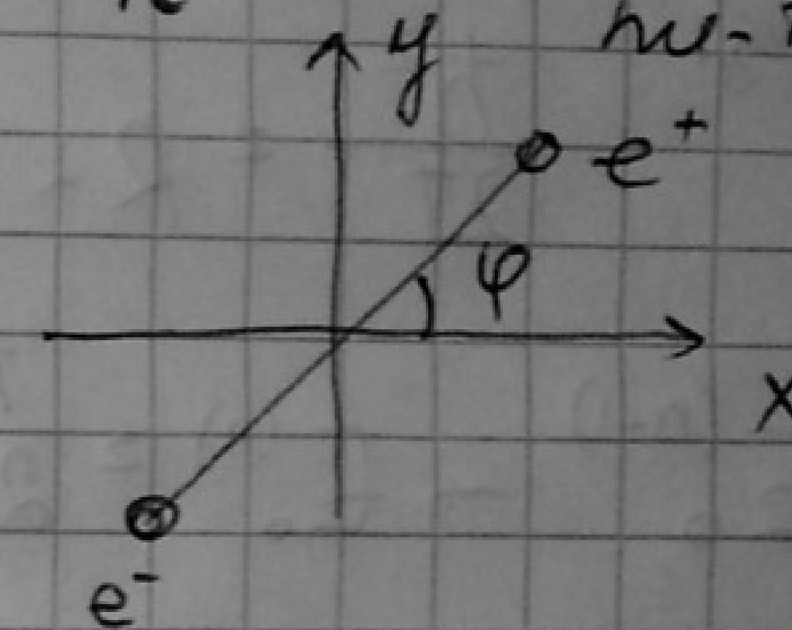
Ex. Плоский ротатор

$$H_0 = \frac{\hat{M}_z^2}{2\cdot I} =$$

момент инерции



ось z ⊥ пл-ти вращ.



$$= -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\cdot\frac{1}{2I}$$

$$H_0\Psi_0^{(n)} = E_0^{(n)}\Psi_0^{(n)}(\varphi)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\Psi_0^{(n)} = E_0^{(n)}\cdot\Psi_0^{(n)}$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\Psi_0^{(n)} = \overset{\text{СЧ}}{\hbar n}\,\Psi_0^{(n)}$$

$\Psi_0^{(n)} = Ae^{-i\hbar\cdot n\varphi}$, $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$, n – произвольн. ($n = 0, \pm1, \pm2\ldots$)

$$(\Psi_0^{(n)},\Psi_0^{(k)}) \overset{?}{=} \int_0^{2\pi} d\varphi\, \Psi_0^{(n)}(\varphi)\cdot\Psi_0^{(k)}(\varphi)$$

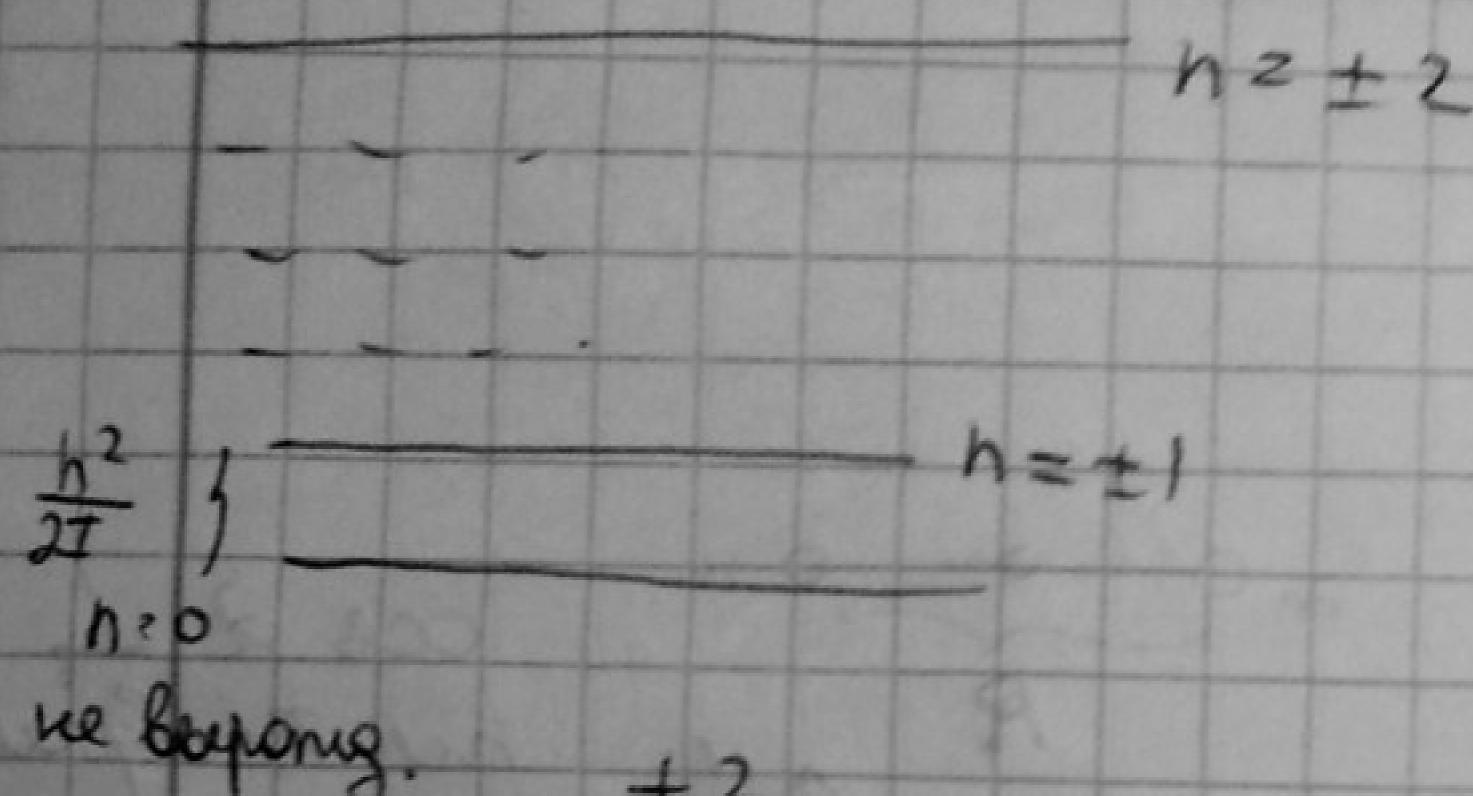
нужно найти связь м/у $E_0^{(n)}$ и n – дисперс. соотн.

Док-ем, что n и ... дисп. знач. – целые

гранич. услов. периодичность по углу φ,

тогда $n = 0, \pm1, \pm2\ldots$

$$\frac{\hbar^2}{2I}n^2 = E_0^{(n)}$$



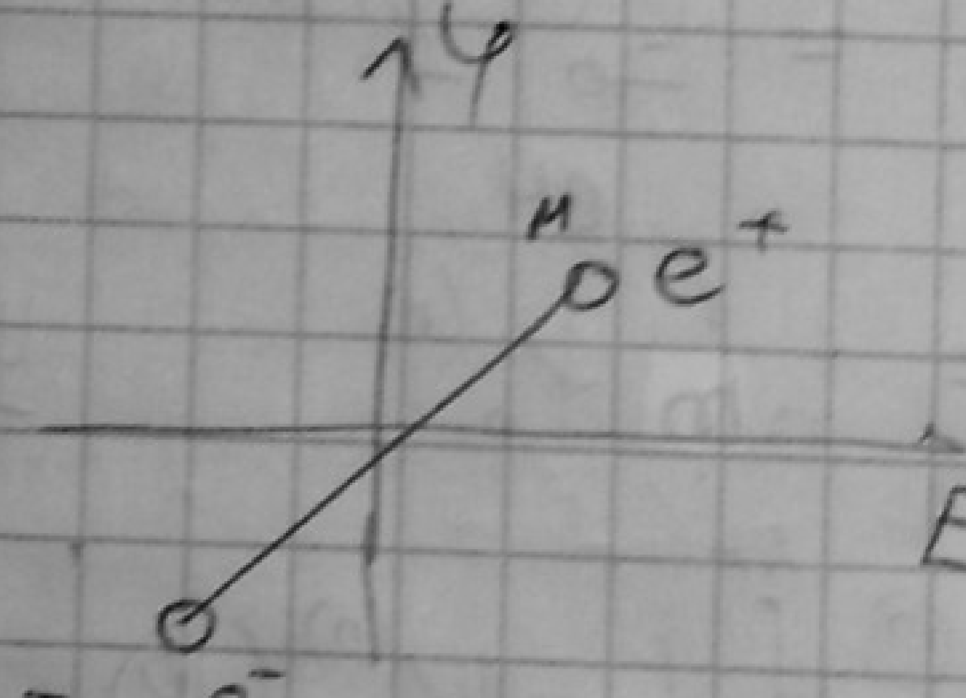
$$\frac{\hbar^2}{2I} = R \text{ — вращ. пост.}$$

$$E_0^{(n+1)} - E_0^{(n)} = \frac{\hbar^2}{2I}\left((n+1)^2 - n^2\right) = \frac{\hbar^2}{2I}(2n+1)$$

Возмущ. основ. сост. ротатора в внеш. эл. полем.

$$V = -dE\cos\varphi$$

$d = R \cdot e$ — дипольный момент



$$\left(-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} - dE\cos\varphi\right)\Psi(\varphi) = E\Psi(\varphi)$$

Найдем $E_1^{(0)} = 0$ $\quad E_2^{(0)} = ?$

$$E_1^{(0)} = \left(\Psi_0^{(0)}, (-dE\cos\varphi)\Psi_0^{(0)}\right) = 0$$

$$\Psi_0^{(n)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\hbar n\varphi} \qquad \Psi_0^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$$V_{m,0} = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{i\hbar m\varphi}(-dE\cos\varphi)\,1\,d\varphi =$$

$m = \pm 1$ в ост. случ. $= 0$

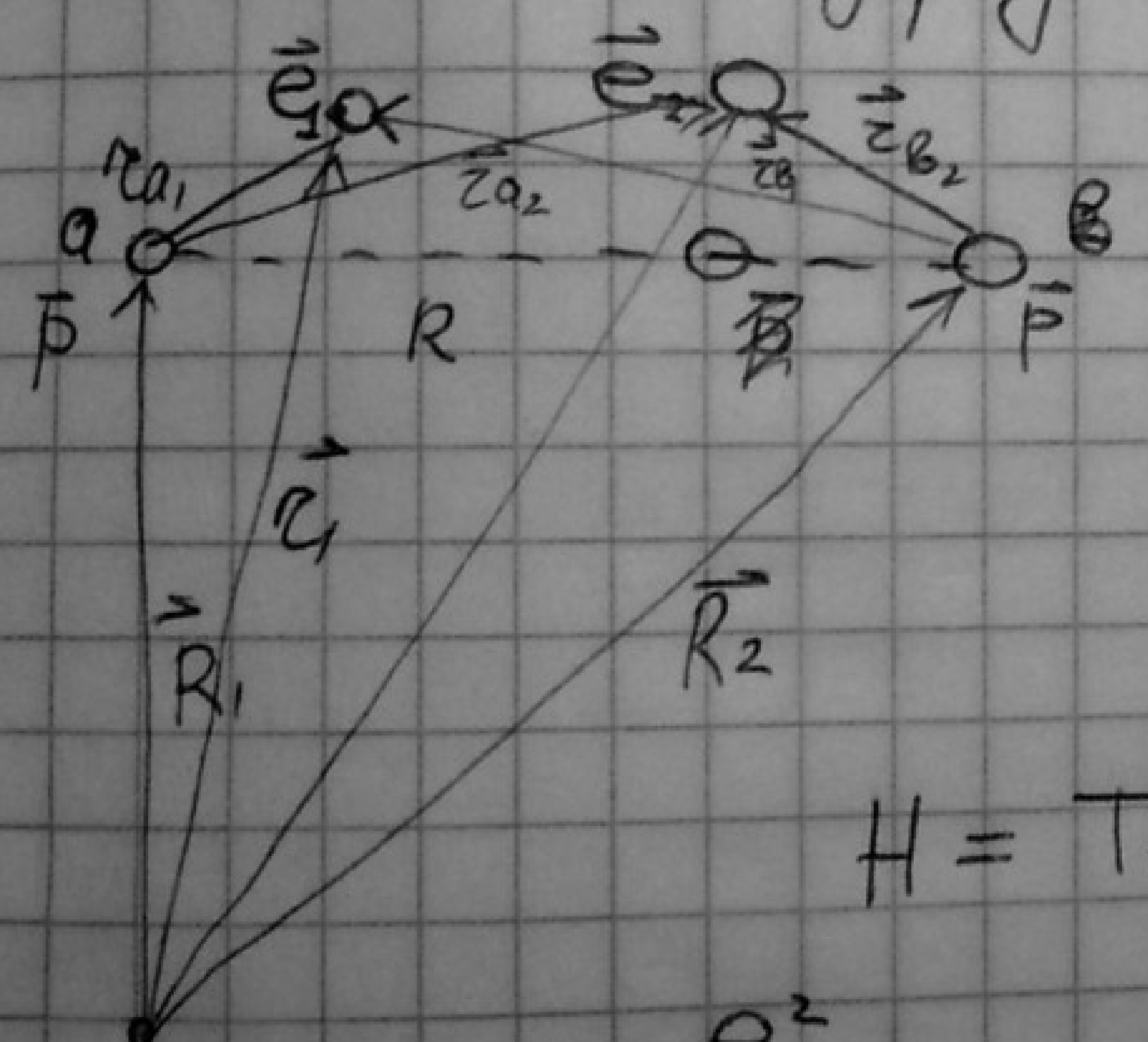
$$= -\frac{dE}{2\pi}\cdot\frac{1}{2}\cdot 2\pi = -\frac{dE}{2}$$

т.к. 2 состояний

$$E_2^{(2)} = -\left(\frac{\left(\frac{dE}{2}\right)^2\cdot 2}{\frac{\hbar^2}{2I}}\right)$$

т.е. уровень понизится

2^х атомный водород H_2.



$$\vec R_1 + \vec r_{a_1} = \vec r_1$$

$$\vec r_{a_1} = \vec r_1 - \vec R_1$$

$$H = T_1 + T_2 + V_{a_1} + V_{b_1} + V_{a_2} + V_{b_2} + \frac{e^2}{R} + V_{12}$$

$$V_{a_1} = \frac{-e^2}{r_{a1}}$$

$$V_{12} = \frac{e^2}{(\vec r_1 - \vec r_2)}$$

$R \to \infty$ перескок $\to 0$