Основа кв. механіки та атомної фізики [illegible]

Мат. апарат ~~Основні поняття~~ квантової механіки

Для опису законів механіки Ньютону знадобився новий мат. апарат – диференційне числення. Закони квант. механіки можуть бути охарактеризовані з допомогою інших мат. засобів операторів.

Оператор – правило переведення однієї ф-ї в іншу

$\Phi = \hat{A}\varphi$; $\varphi = ax^2$ $\hat{A} = \frac{d}{dx} \Rightarrow \Phi = 2ax$; $\hat{A} = \sqrt{\ } \Rightarrow \Phi = \sqrt{a}\,x$

Оператор наз. лінійним, якщо

$$\hat{A}(C_1\varphi_1 + C_2\varphi_2) = C_1\hat{A}\varphi_1 + C_2\hat{A}\varphi_2$$

Сума двох операторів $\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}$; $\hat{C}\varphi = \hat{A}\varphi + \hat{B}\varphi$

Добуток $\hat{C} = \hat{A}\cdot\hat{B}$; $\hat{C}\varphi = (\hat{A}\hat{B})\varphi = \hat{A}(\hat{B}\varphi)$

В загальному випадку добуток залежить від порядку дії операторів

Комутатором операторів $\hat{A}$ і $\hat{B}$ називається оператор

$$[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Якщо $[\hat{A},\hat{B}]\varphi = 0$ ($\varphi - \forall$), то оператори наз. комутуючі

Кожному оператору співставляється р-ня (р-ня на власні ф-ї та власні значення)

$\hat{F}\varphi = f\varphi$ f - число, власне значення

φ – власна ф-я

$\hat{F}\varphi_1 = f\varphi_1$
$\hat{F}\varphi_2 = f\varphi_2$ $\Rightarrow$ f - вироджене власне значення, n-кратність (к-ть лін. незалежних ф-й)
$\hat{F}\varphi_n = f\varphi_n$

{f} - спектр, буває ~~вироджений~~ дискретним (f_1, f_2, f_3 ..) та неперервним ($0 \le f \le 5$) $f \in [0,5]$

Заг. випадок
$\hat{F}\varphi_1 = f_1\varphi_1$
$\hat{F}\varphi_2 = f_2\varphi_2$
$\hat{F}\varphi_N = f_N\varphi_N$

Комплексно-спряжений оператор $\hat{F}^*$:

$$\hat{F}^*\psi^* = f^*\psi^*$$

Транспонований оператор $\tilde{\hat{F}}$

$$\int \varphi_1^*(\hat{F}\varphi_2)d\tau = \int \varphi_2^*(\tilde{\hat{F}}\varphi_1)d\tau$$

Спряжений оператор $\hat{F}^+ = \tilde{\hat{F}}^*$ (транспонований до комплексно-спряженого)

Самоспряжений оператор (ермітовий), якщо

$$\hat{F}^+ = \hat{F}$$

для самоспряженого оператора

В математиці скалярний добуток двох ф-й φ_1 та φ_2

$\int \varphi_1^*\varphi_2\, d\tau = I$ $d\tau$ - елементарний об'єм простору, де визначені ф-ї, інтегрування по всьому простору

інше позначення $I = \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle$ – дужки Дірака
"бра" "кет"

Якщо $I = 0$, то ф-ї ортогональні

Без квантової теорії не було б атомної зброї, телебачення, комп'ютерів, молекулярної біології, сучасної генетики...

Середнє значення оператора у стані, що описується ф-єю φ

$$\bar{F} = \int \varphi^* \hat{F} \varphi \, d\tau = \langle \varphi | \hat{F} | \varphi \rangle = \langle F \rangle$$

Оператор $\hat{F}^+$ наз. ермітово спряженим до оператора $\hat{F}^+$, якщо

$$\int \varphi_1^* \hat{F} \varphi_2 \, d\tau = \int (\hat{F}^+ \varphi_1)^* \varphi_2 \, d\tau \qquad (\hat{F}^+)^+ = \hat{F}$$

$$\langle \varphi_1 | \hat{F} | \varphi_2 \rangle = \langle \hat{F}^+ \varphi_1 | \varphi_2 \rangle$$

Якщо $\hat{F} = \hat{F}^+$, то оператор наз. самоспряженим.

Середні значення самоспряжених операторів дійсні:

$$(\bar{F})^* = \int \varphi \cdot (\hat{F}\varphi)^* d\tau = \int \varphi^* \cdot \hat{F}^+ \varphi \, d\tau = \int \varphi^* \hat{F} \varphi \, d\tau = \bar{F}$$

Різні власні ф-ї ~~знач~~ самоспряженого оператора ортогональні:

$\star$ виродження відсутнє

$$\int, \ \varphi_m^* \,| \qquad \hat{F}\varphi_n = f_n \varphi_n$$

$$\int, \ \varphi_n \,| \qquad (\hat{F}\varphi_m)^* = f_m \varphi_m^*$$

$$\int \varphi_m^* \hat{F} \varphi_n \, d\tau - \int \varphi_n (\hat{F}\varphi_m)^* d\tau = \int \left(\varphi_m^* \hat{F} \varphi_n - \varphi_m^* \hat{F} \varphi_n\right) d\tau = 0 = (f_n - f_m) \int \varphi_m^* \varphi_n \, d\tau$$

$$f_n \neq f_m \Rightarrow \int \varphi_m^* \varphi_n \, d\tau = 0$$

Якщо виродження наявне, то власні ф-ї вибираються не однозначно (лінійна комбінація вл-них ф-й, які належать одному власному значенню також є власною цього $\star$ значення) і тому вибором коеф. лінійної комбінації ф-ї можна ортогоналізувати (~~вибрати такі вл~~ (для кожного власного значення вибрати такі власні ф-ї, які ортогональні між собою і кількість яких дорівнює кратності виродження)

Для широкого класу операторів сист. вл-них ф-й є повною:
довільна ф-я ψ, яка задана в тій же обл. змінних і задовольняє тим же крайовим умовам, що і вл-ні ф-ї $\{\varphi_n\}$ може бути розкладена в ряд за цими ф-ями

$$\psi = \sum_n a_n \varphi_n$$

Якщо два оператори комутують між собою, то існує спільна система вл-них ф-й цих операторів

$$[\hat{F}, \hat{G}] = 0 \quad , \quad \{\psi_n\} \quad : \quad \hat{F}\psi_n = f_n \psi_n \ ; \quad \hat{G}\psi_n = g_n \psi_n$$

Якщо існує спільна система власних ф-й, то оператори комутують

Без доведення :-)

Атоми переважно порожні: між ядром та електронними оболонками нічого немає, там вакуум. Якщо збільшити атом до розмірів футбольного поля, то воно виявиться порожнім: ядро приблизно матиме розмір пісчинки.
Якщо ми з вами переважно порожні, то чому не можемо проходити через стіни? (як привиди, що можуть проходити через будь-що окрім твердої ~~пі~~ підлоги :-))
Принцип Паулі => при зближенні два майже ідентичних електрони відштовхуються, тому ~~обєє~~ об'єкти здаються твердими, ~~хоча~~ що загалом є ілюзією.
Коли сідаємо на стілець, то думаємо, що доторкаємося до його поверхні насправді, ми зависаємо трошки вище під дією електричних і квантових ~~е~~ сил стільця і плаваємо менше чим на відстані 1 нм від сидіння.

Деякі принципи квантової механіки, що здаються занадто незрозумілими
- неможливо знати одночасно швидкість частинки та її положення в просторі
- частинки у певному сенсі можуть знаходитись у декількох місцях одночасно
- всі частинки існують як суміш різних станів: частинка яка обертається, може бути представлена як суміш частинок, які обертаються одночасно вгору і вниз

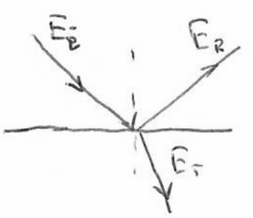
Ейнштейн "Чим ~~уп~~ успішнішою стає квантова теорія, тим дурнішою вона виглядає"

Ніхто не знає звідки з'являються такі дивні закони. Вчені просто постулювали їх. І виправдання цьому лише одне: квантова теорія правильна, її точність виміряна до 10^{-10}, вона сама точна та успішна ~~то~~ фізична теорія всіх часів.

~~Н~~ Надпровідність та магнетизм - квантово-механічні явища.

Хто не шокований квантовою теорією, той її не зрозумів
Н. Бор.

Основні поняття квантової механіки



* Світло падає на межу двох середовищ

$E_i = E_{i0} \cos(\vec{k}_i \vec{r}_i - \omega t)$

$E_R = E_{R0} \cos(\vec{k}_2 \vec{r}_2 - \omega t)$

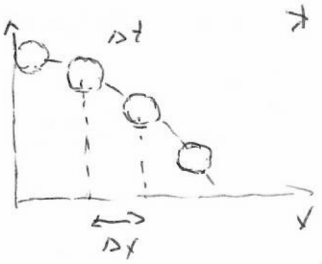
$E_T = E_{T0} \cos(\vec{k}_T \vec{r}_T - \omega t)$

З корпускулярної точки зору: $\omega_i = \omega_R = \omega_T = \omega$ => частинка не ділиться на відбиту та заломлену, а випадково потрапляє в одну із хвиль

Дифракція електронів на двох щілинах => принципово неможливо визначити через яку з щілин пройде конкретний ел-н. => якщо є деякий початковий стан і декілька можливих кінцевих, то внаслідок вимірювання (кінцевого) можна отримати різні значення.

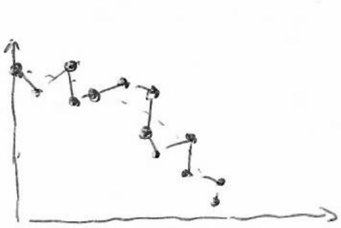
Квантова механіка дає можливість обчислити ймовірність певного значення та середнє значення.

Система має описуватися статистично



* Тіло кинуте горизонтально падає з деякої висоти. Для фіксації положення в певний момент часу освітлюємо тіло і визначаємо положення тіла (відбиті фотони).

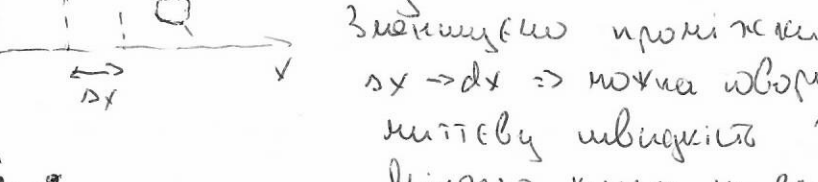
Зменшуємо проміжки між спалахами $\Delta t \to dt$, $\Delta x \to dx$ => можна говорити про траєкторію, про миттєву швидкість $v = dx/dt$



Міняємо кульку на ел-н. Кожна вз-я ел-н - фотон => пружне розсіювання, при $\Delta t \to dt$, не обов'язково $\Delta x \to dx$, відстані можуть виявитися цілком скінченними => втрачає зміст поняття траєкторії як неперервної лінії, дотична до якої визначає напрям $\vec{V}$.

=> при визначенні положення мікрооб'єкта не можна нехтувати його взаємодією з приладом.

Квантовий постулат Бора: ∀ спостереження квантового мікрооб'єкта обов'язково передбачає його вз-ю з засобами спостереження, причому величина вз-ї не менша $\hbar$.



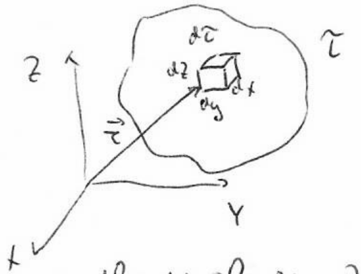
Певного значення фізична величина набуває в результаті вимірювання, це значення визначається як вл-ми мікрооб'єкта, так і процедурою вимірювання (умовами експерименту). При повторних вимірюваннях можуть спостерігатися інші результати. Квантова індивідуальність кожного вимірювання визначає статистичний х-р отриманих результатів.

Постулат 1 (квантової механіки): кожній фізичній величині F ставиться у відповідність певний оператор $\hat F$.

$\boxed{\text{прилад}} \xrightarrow[\text{вимір}]{} \equiv \hat{\hat F}$ Фактично $\hat F$ описує процедуру вимірювання, ~~Зна~~ Спектр оператора — це значення фіз. величини, які можуть бути отримані в результаті вимірювання. Оператори фіз величин самоспряжені.

Постулат 2. Стан квантової мікросистеми може бути описаний певною комплексною ф-єю координат та часу $\Psi(\vec r, t)$ — хвильовою функцією

Фіз. зміст хвильової ф-ї з'ясований Борном (1926).



Я частинка рухається в межах об'єму τ. Тоді ймовірність знаходження частинки в об'ємі dτ з координатами $(x \div x+dx;\ y \div y+dy,\ z \div z+dz)$

$$dP(x,y,z,t) = \Psi(\vec r,t)\cdot\Psi^*(\vec r,t)\,dx\,dy\,dz = |\Psi|^2 d\tau$$

Якщо $d\tau = 1$ => $|\Psi|^2 = dP$ - квадрат модуля хвильової функції дорівнює імовірності знаходження частинки в одиничному об'ємі, $|\Psi|^2$ - густина імовірності.

Знайти частинку саме у цьому об'ємі - подія достовірна.

$$P = \int_\tau dP = \iiint_{xyz} |\Psi|^2\, dx\,dy\,dz = 1$$

$$\int |\Psi|^2 d\tau = 1$$ - умова нормування хв. ф-ї

Хв. ф-я має бути
- однозначною (як імовірність у кожній точці)
- неперервною, як і її перша похідна
- скінченною

Якщо частинок дві, то

$$dP = |\Psi(x_1,y_1,z_1,x_2,y_2,z_2,t)|^2\, dx_1 dy_1 dz_1 dx_2 dy_2 dz_2$$ -

імовірність того, що в момент часу t частинка 1 буде виявлена в dV_1, а частинка 2 - в dV_2. $d\tau = dV_1 dV_2$

$\hat F \Psi$ - процедура вимірювання фізичної величини F для системи, яка описується хв. ф-єю Ψ. $\hat F\Psi = \varphi$

В загальному випадку $\hat F \Psi = \Psi^*$ - змінюється стан системи

$\hat F \Psi_n = f_n \Psi_n$ => система знаходиться у стані, який описується власною ф-єю оператора $\hat F$; результат вимірювання - цілком певне власне значення

Вимірювання передбачуване, результат спостерігається з імовірністю = 1.

Постулат 3 (принцип суперпозиції станів) Якщо в результаті вимірювання фіз величини F ~~[illegible]~~ в стані ψ_n отримується значення f_n, в стані ψ_m – f_m, то в результаті виміру в стані $\psi = a_1\psi_n + a_2\psi_m$ буде отримане або значення f_n, або f_m

Допустимо стан довільний ψ. Якщо цю ф-ю розкласти по власним ф-ям оператора F

$$\psi = \sum_n C_n \psi_n$$ => в результаті виміру отримується одне з власних значень (з різними імовірностями)

$\int, \times \psi_m^*$

$$\int_\tau \psi_m^* \psi \, d\tau = \langle \psi_m | \psi \rangle = \int_\tau \psi_m^* \Big(\sum_n C_n \psi_n\Big) d\tau =$$

$$= \sum_n C_n \int \psi_m^* \psi_n \, d\tau = \sum_n C_n \delta_{mn} = C_m$$

$$\int \psi_n^* \psi_m \, d\tau = \delta_{mn} = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ 1, & m = n \end{cases}$$

0, $m \neq n$ через ортогональність власних ф-ї самоспряженого оператора фіз величин

символ Кронекера

1, $m = n$ через умову нормування

$C_m = \langle \psi_m | \psi \rangle$; $C_m^* = \int \psi_m \psi^* d\tau$

Якщо спостерігаються $\{f_n\}$ результатів виміру то середнє значення $\bar{F} = \sum_n P_n f_n$, де P_n – імовірність спостереження величини f_n, $P_n = \lim\limits_{N_\Sigma \to \infty} \left(N_{f_n} / N_\Sigma\right)$, N_Σ - загальна кількість вимірювань

$$\bar{F} = \int \psi^* \hat{F} \psi \, d\tau = \int \sum_m C_m^* \psi_m^* \hat{F} \sum_n C_n \psi_n \, d\tau = \sum_{n,m} C_m^* C_n \int \psi_m^* \hat{F} \psi_n d\tau =$$

$$= \sum_{n,m} C_m^* C_n \int \psi_m^* f_n \psi_n^* d\tau = \sum_{n,m} C_m^* C_n f_n \delta_{mn} = \sum_n |C_n|^2 f_n$$

$$\Rightarrow \quad P_n = |C_n|^2$$

Постулат 4 Хвильова ф-я може бути визначена шляхом розв'язку р-ня Шредінгера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r}, t)\right] \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t}$$

=> в заг. випадку ψ є комплексною ф-єю

Δ - оператор Лапласа, в ПДСК $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

U - потенціальна енергія системи

Рівняння було встановлено в 1926р, при цьому використано ідеї де Бройля та "оптико-механічну аналогію" - подібність руху частинки у потенціальному полі та розповсюдження променя в неоднорідному середовищі $\int_1^2 n(\vec{r}, \omega) dl$ - min - принцип Ферма

$\int_1^2 \sqrt{2m(E - U(l))} dl$ - min принцип найменшої дії Лагранжа.

Стаціонарне р-ня Шредінгера

Розглянемо ~~окремий~~ частинний, але важливий випадок, коли пот. енергія не залежить від часу (частинка рухається в стац. полі)

$\hat{U}(\vec{r},t) = U(\vec{r})$

Тоді $\Psi(\vec{r},t) = \varphi(\vec{r})\cdot f(t)$ - змінні розділяються

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta(\varphi\cdot f) + U\cdot\varphi\cdot f = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\varphi\cdot f)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}f\cdot\Delta\varphi + U\cdot\varphi\cdot f = i\hbar\varphi\frac{\partial f}{\partial t} \qquad \frac{1}{\varphi\cdot f}$$

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta\varphi}{\varphi} + U}_{\text{залежить тільки від коорд}} = \underbrace{i\hbar\frac{1}{f}\frac{df}{dt}}_{\text{від часу}} = E = const$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta\varphi}{\varphi} + U = E \quad\Rightarrow\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi + U\varphi = E\varphi$$

$$i\hbar\frac{1}{f}\frac{df}{dt} = E \quad\Rightarrow\quad \frac{df}{f} = -\frac{i}{\hbar}E\,dt \quad ; \quad \int\frac{df}{f} = -\frac{iE}{\hbar}\int dt + \ln C$$

$$\ln f = -i\frac{E}{\hbar}t + \ln C \qquad f(t) = C\exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right) = f(0)\,e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

періодична ф-я.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(\vec{r}) + U(\vec{r})\varphi(\vec{r}) = E\cdot\varphi(\vec{r})$$ - стац. р-ня Шредінгера.

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

$\hat{H}\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r})$ - р-ня на вл-ні ф-ї та знач оператора $\hat{H}$

$\hat{H} = \hat{K} + \hat{U}$; $\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$ - оператор кін. енергії

$\hat{U} = U(\vec{r})$ - -//- пот. енергії

$\hat{H}$ - -//- повної енергії

E - можливі знач. енергії системи

ХВ. ф-я частинки в стац. полі:

$$\Psi(\vec{r},t) = \varphi(\vec{r})\cdot\exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)$$

$$|\Psi(\vec{r},t)|^2 = \varphi(\vec{r})\cdot\exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)\cdot\varphi^*(\vec{r})\exp\left(i\frac{E}{\hbar}t\right) = |\varphi(\vec{r})|^2$$ - не залежить від часу, подібні стани наз. стаціонарними.

Диференціювання операторів за часом

У квант. механіці класичне визначення похідної втрачає зміст. В той же час кв. мех. дозволяє передбачати середні значення $\bar{F}$ ~~за~~ (якщо відома ХВ ф-я), причому ~~ви~~ сер. знач. змінюються у часі неперервно. Похідною за часом від величини F називають таку величину, середнє знач. якої дорівнює похідній за часом від середнього значення величини F

$\hat{\dot F} \equiv \frac{d\hat F}{dt}$ $\qquad \overline{\frac{dF}{dt}} = \frac{d}{dt}\overline{F}$ $\qquad : \langle \frac{dF}{dt}\rangle = \frac{d}{dt}\langle F\rangle$

$$\frac{d}{dt}(\bar F) = \frac{d}{dt}\int \psi^*(\hat F\psi)d\tau = \int\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\hat F\psi + \psi^*\frac{\partial \hat F}{\partial t}\psi + \psi^*\left(\hat F\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)\right)d\tau$$

р-ня Шр. $\hat H\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$; $\Rightarrow$ $\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\hat H\psi$

$$\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}(\hat H^{\cancel{*}}\psi)^*$$

$$\frac{d}{dt}\langle F\rangle = \int\left[\frac{i}{\hbar}(\hat H^{\cancel{*}}\psi)^*\hat F\psi + \cancel{\hbar}\,\psi^*\frac{\partial\hat F}{\partial t}\psi + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\psi^*\hat F\hat H\psi\right]d\tau$$

$\int(\hat H^{\cancel{*}}\psi^{\cancel{*}})^*(\hat F\psi)d\tau = \int\psi^*\hat H\hat F\psi\, d\tau$ – $\hat H$ - самоспряжений

$$\frac{d}{dt}\langle F\rangle = \int\psi^*\left[\frac{i}{\hbar}\hat H\hat F + \frac{\partial\hat F}{\partial t} - \frac{i}{\hbar}\hat F\hat H\right]\psi\, d\tau =$$

$$= \int\psi^*\left\{\frac{\partial\hat F}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[\hat H,\hat F]\right\}\psi\, d\tau$$

$$\boxed{\widehat{\frac{dF}{dt}} = \hat{\dot F} = \frac{\partial \hat F}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[\hat H,\hat F]}$$ - оператор похідної

Закон. збер. у квант. мех: фізична величина зберігається з часом, якщо сталим у часі залишається її середнє значення

$\langle F\rangle = const$, $\frac{d}{dt}\langle F\rangle = 0$

для цього потрібно:
1) оператор фіз. величини явно не залежить від часу
2) — // — // — комутує з $\hat H$

про середнє взагалі

Якщо у деякому стані (така) фіз. величина має певне значення (хв. ф-я стану є власною оператора.) то і у іншому стані вона буде мати те ж саме значення (виродження ??).

Оператори основних фізичних величин

Кв. мех. використовує для опису мікрооб'єктів ті ж самі фіз. величини, що і класична фізика: час, коорд., імпульс, момент. імпульсу, енергія. Проте кв. мех. опис вимагає введення операторів для відображення процесу вимірювання, причому вигляд оператора може істотно відрізнятися від виразу для цієї величини у клас. мех. Але співвідношення між операторами повинні бути аналогічні співвідношенням між фіз. величинами клас. фізики – принцип відповідності. (Відображає єдність фундаментальних фіз. понять при описі процесів у різних просторово-часових та імпульсно-енергетичних масштабах)

1) Оператор часу

вважається, що при переході до мікросвіту вл-ті часу не змінюються $\Rightarrow \hat{t} = t$, дія зводиться до множення на t час може приймати $\forall$ значення (>0 :-)) $\Rightarrow$ оператор має неперервний спектр.

2) Оператор координати

Оскільки $|\psi(\vec{r})|^2$ - густина ймовірності знаходження частинки, то середнє значення координати за стат. законами

$$\langle\vec{r}\rangle = \overline{\vec{r}} = \int \vec{r}\,|\psi(\vec{r})|^2 dV = \int \psi^* \vec{r}\,\psi\, dV$$

отже $\hat{\vec{r}} = \vec{r}$, $\hat{x} = x$, $\hat{y} = y$; $\hat{z} = z$, класичне поняття простору збігається з квантовим, дія оператора зводиться до множення

$$\hat{\vec{r}} = \hat{x}\,\vec{i} + \hat{y}\,\vec{j} + \hat{z}\,\vec{k} = x\vec{i} + y\vec{j} + z\vec{k}$$

Рівняння на вл-ні ф-ї та вл. зн: (спектр неперервний)

$$\hat{x}\,\psi_{\tilde{x}} = x\cdot\psi_{\tilde{x}} = \tilde{x}\,\psi_{\tilde{x}}$$ $\tilde{x}$ - певне знач. координати

$$\psi_{\tilde{x}} = \delta(x-\tilde{x}) = \begin{cases} 0, & x \neq \tilde{x} \\ \infty, & x = \tilde{x} \end{cases}$$ - δ-ф-я Дірака

Вл-ті:

а) $\int_{x_1}^{x_2} \delta(x-\tilde{x})\,dx = 1$, якщо $\tilde{x} \in [x_1, x_2]$

б) $\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\delta(x-\tilde{x})\,dx = f(\tilde{x})$

в) $\delta(x-\tilde{x}) = \delta(\tilde{x}-x)$ ф-я парна

г) $\delta(a\cdot x) = \frac{\delta(x)}{a}$ $a = const$

д) $(x-\tilde{x})\,\delta(x-\tilde{x}) = \emptyset$

е) $\int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\alpha(x-\tilde{x}))\,d\alpha = 2\pi\,\delta(x-\tilde{x})$

можна нерідко замість $\tilde{x}$ писати x_n

умова нормування $\int \psi_{x_n}\psi_{x_m}\,dx = \int \delta(x-x_n)\,\delta(x-x_m)\,dx = \delta(x_n - x_m)$ - нормування не на 1, а на δ-ф-ю, бо спектр неперервний

3D. випадок $\psi_{\vec{\tilde{r}}} = \delta(\vec{r} - \vec{\tilde{r}}_0)$

3) Оператор енергії

$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U$ - повної; $\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$ - кінетичної; $\hat{U} = U(\vec{r})$ - потенціальної

пошук вл. ф-ій та вл. знач - розв'язок стац. р-ня Шредінгера

4) Оператор імпульсу

клас. механіка: $K = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$; $\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \Rightarrow$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta = \frac{\hat{p}\cdot\hat{p}}{2m} \Rightarrow \hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$$ (знак "−", а не "+" випливає з механіки Лагранжа ??)

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x};\quad \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y};\quad \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

$\hat p_x \psi_{p_x} = p_x \psi_{p_x} \Rightarrow -i\hbar \frac{\partial \psi_{p_x}}{\partial x} = p_x \psi_{p_x}$

$\frac{\partial \psi_{p_x}}{\psi_{p_x}} = \frac{p_x}{-i\hbar}\partial x = i\frac{p_x}{\hbar}\partial x \qquad \psi_{p_x} = C\exp(+\frac{i}{\hbar}p_x x)$

обмежень на p_x не накладаються => спектр $\hat p_x$ неперервний, $p_x \in (-\infty, +\infty)$
(p_x дійсне бо 1) оператор самоспряжений 2) ψ_{p_x} має бути обмеженою)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*_{p_x} \cancel{\hat p_x} \psi_{p_x} dx = \int C^* \exp(-\frac{i}{\hbar}p_x x)\cdot C\exp(\frac{i}{\hbar}p_x x)dx = |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \to \infty \neq 1$$

нормування на 1 неможливе (спектр неперервний) => нормування на δ-ф-ю

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*_{p_{x_1}} \cdot \psi_{p_{x_2}} dx = \delta(p_{x_1} - p_{x_2}) = |C|^2 \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-\frac{ix}{\hbar}(p_{x_1} - p_{x_2})]dx =$$

$$= |C|^2 \cdot 2\pi\, \delta[-\frac{1}{\hbar}(p_{x_1} - p_{x_2})] = |C|^2 \cdot 2\pi\hbar\, \delta(p_{x_1} - p_{x_2})$$

$\Rightarrow |C|^2 2\pi\hbar = 1 \qquad C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$

$$\psi_{p_x}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp(\frac{i}{\hbar}p_x x)$$

$-i\hbar \vec\nabla \psi_{\vec p} = \vec p \psi_{\vec p} \qquad -i\hbar(\frac{\partial \psi_{\vec p}}{\partial x}\vec i + \frac{\partial \psi_{\vec p}}{\partial y}\vec j + \frac{\partial \psi_{\vec p}}{\partial z}\vec k) = (p_x \vec i + p_y \vec j + p_z \vec k)\psi_{\vec p}$

$-i\hbar \frac{\partial \psi_{\vec p}}{\partial x} = p_x \cdot \psi_{\vec p}$ ...

$[\hat p_i, \hat p_j] = 0$ => існує спільна система власних ф-й
$[\hat p, \hat p_i] = 0$

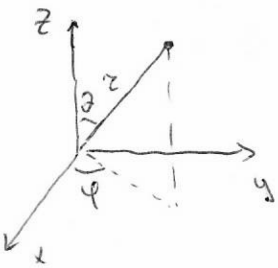
$$\Downarrow \quad \psi_{\vec p} = \psi_{p_x}\cdot\psi_{p_y}\cdot\psi_{p_z} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\exp[\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y + p_z z)] = (2\pi\hbar)^{-3/2}\cdot\exp(\frac{i}{\hbar}\vec p\cdot\vec r)$$

5) оператор моменту імпульсу

$\vec L = [\vec r, \vec p] = \begin{vmatrix} \vec i & \vec j & \vec k \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix} \qquad \hat L = [\hat r, \hat p] = -i\hbar[\vec r\, \vec\nabla]$

$$\hat L = -i\hbar \begin{vmatrix} \vec i & \vec j & \vec k \\ x & y & z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix} \Rightarrow \begin{array}{l} L_x = -i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}) \\ L_y = -i\hbar(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}) \\ L_z = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) \end{array}$$

Для опису властивостей оператора $\hat L$ зручно користуватися ССК



$x = r\sin\theta\cos\varphi$

$y = r\sin\theta\sin\varphi \qquad \hat L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$

$z = r\cos\theta$

$d\tau = dV = r^2 dr \sin\theta d\theta \cdot d\varphi$

$$\hat{L}_z\Psi = L_z\Psi \Rightarrow -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} = L_z\psi \qquad \psi = C\exp\left(\frac{i}{\hbar}L_z\varphi\right)$$

щоб ψ була однозначною, необхідно $\psi(\varphi+2\pi)=\psi(\varphi)$

$$C\exp\left(\frac{i}{\hbar}L_z\varphi\right) = C\exp\left(\frac{i}{\hbar}L_z(\varphi+2\pi)\right)$$

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}L_z\cdot 2\pi\right) = 1 = \cos\left(\frac{L_z\cdot 2\pi}{\hbar}\right) + i\sin\left(\frac{2\pi L_z}{\hbar}\right)$$

$\Rightarrow 2\pi\frac{L_z}{\hbar} = 2\pi m$, $m = 0, \pm1, \pm2$; $\boxed{L_z = m\hbar}$ - спектр дискретний

$\psi = C\exp(im\varphi)$ $\int_0^{2\pi}|\psi|^2 d\varphi = \int_0^{2\pi}|C|^2 d\varphi = 2\pi|C|^2 = 1$; $C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$

$\boxed{\psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(im\varphi)}$ m – магнітне квантове число

б) оператор квадрату моменту імпульсу - відіграє важливу роль

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

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

$$\hat{L}^2\psi = L^2\psi \Rightarrow -\hbar^2\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right\} = L^2\psi \Rightarrow$$

$\psi = \psi(\theta,\varphi)$

позначивши $\frac{L^2}{\hbar^2} = \lambda$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \lambda\psi = 0$$

це диф. р-ня для ~~сфер~~ сферичних ~~кульових~~ ф-й, воно має розв'язок лише при $\lambda = l(l+1)$, де $l = 0, 1, 2 \ldots$

Отже $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$, $L = \hbar\sqrt{l(l+1)}$ - спектр дискретний

l – азимутальне (орбітальне) квантове число

Вл. ф-ї L^2 - сферичні ф-ї

$$\psi_L(\theta,\varphi) = Y_{l,m}(\theta,\varphi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}\sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{2(l+|m|)!}}P_l^m(\cos\theta)$$

m - ціле число, $|m| \le l$, $m = 0, \pm1, \pm2 \ldots \pm l$

$$P_l^m(\cos\theta) = (1-\cos^2\theta)^{\frac{|m|}{2}}\frac{d^{|m|}}{d(\cos\theta)^{|m|}}P_l(\cos\theta)$$ - приєднаний поліном Лежандра

$$P_l(\cos\theta) = \frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{d(\cos\theta)^l}\left[(\cos^2\theta-1)^l\right]$$ - поліном Лежандра

$Y_{lm}(\theta,\varphi)$ - ортонормовані

кожному вл. зн. $L = \hbar\sqrt{l(l+1)}$ відповідають $(2l+1)$ Y_{lm} з різними значеннями $m \Rightarrow$ виродження по m з кратністю $(2l+1)$

$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$; $Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$;

$Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta \, e^{\pm i\varphi}$

$$Y_{\ell m} = f(\theta) e^{im\varphi} \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$$\hat{L}_z Y_{\ell m} = \hat{L}_z (f(\theta) e^{im\varphi}) = f(\theta) \hat{L}_z e^{im\varphi} = f(\theta) L_z e^{im\varphi} = L_z Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$$

тобто $Y_{\ell m}$ - вл. ф-я як $\hat{L}^2$, так і $\hat{L}_z$ при $\ell = 0,1,2 ..$ $m = 0, \pm1, \pm2 .. \pm \ell$

Величини L^2 і L_z комутують => одночасно можуть вимірюватися передбачувано.

Парність стану

це суто квантовий ефект. Існує оператор інверсії:

$\hat{P}\psi(\vec{r}) \rightarrow \psi(-\vec{r})$ - описує дзеркальне відбивання в точці

$$\hat{P}^2 \psi(x,y,z) = \hat{P}[\hat{P}\psi(x,y,z)] = \hat{P}\psi(-x,-y,-z) = \psi(x,y,z) = \underset{\uparrow \text{вл. знач}}{P^2}\psi$$

$\boxed{P = \pm 1}$, $\hat{P}\psi = \pm\psi$

~~при $\hat{P}\psi = +\psi$~~ ф-я описує парний стан при $\hat{P}\psi(x,y,z) = +\psi(-x,-y,-z)$

~~$\hat{P}\psi = -\psi($~~ непарний $\hat{P}\psi(x,y,z) = -\psi(-x,-y,-z)$

$[\hat{H},\hat{P}] = 0$, $\frac{\partial \hat{P}}{\partial t} = 0$ => парність стану є величиною, що зберігається

Найбільш інтенсивні переходи квантової системи між стаціонарними станами, які мають різну ~~полярність~~ парність? (дипольні переходи)

В ССК при інверсії $\theta \rightarrow (\pi - \theta)$

$$\varphi \rightarrow (\varphi + \pi)$$

$$\hat{P} Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = (-1)^\ell Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$$

при $\ell = 0,2,4$ - стани парні дипольні переходи $\Delta\ell = \pm 1$

$1,3,5$ непарні

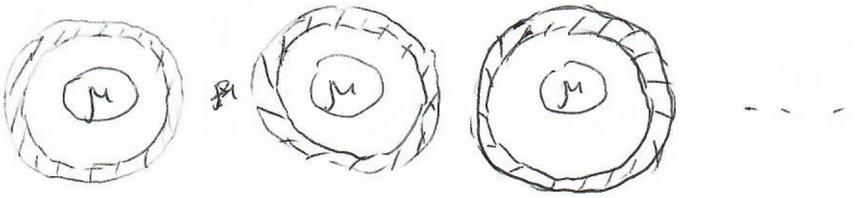
Закон зб. парності - кв.-мех закон, інші перетворення с.к., які залишали незмінним гамільтоніан системи, ще у клас. механіці давали свої закони: паралельний перенос часу - з. збер енергії, пар. перенос. координат - імпульсу, обертання - моменту імп.

Співвідношення невизначеностей Гайзенберга. Принцип доповнювальності Бора

* квантова система перебуває в стані, який описується

$$\psi = \sum_n C_n \psi_n$$

ψ_n - вл. ф-ї певного оператора $\hat{F}$. Міряємо цю величину => отримуємо f_k, система переходить в стан ψ_k (редукція хвильової ф-ї) Повторне вимірювання втрачає сенс, бо воно буде передбачуваним. Для вивчення статистичних закономірностей необхідно мати набір тотожних мікросистем в однакових оточеннях (або одну систему повертати в початковий стан, що еквівалентно появі нової системи)



Ансамбль мікрочастинок – сукупність тотожних мікросистем, які знаходяться в одному і тому ж макрооточенні М.

Х дифракція електронів – М = { системи формування електронного пучка та його реєстрації, діафрагми тощо }

Х на мікроансамблі одночасно вимірюють p_x та x

$$[\hat{p}_x, \hat{x}]\psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}x\cdot\psi - x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi = -i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x} - i\hbar\psi + i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x} = -i\hbar\psi$$

$[\hat{p}_x, \hat{x}] = -i\hbar \neq 0$ => p_x та x не можуть одночасно вимірюватися передбачувано, бо в них відсутня спільна система власних ф-ій => => вимірювання будуть характеризуватися розкидом.

$\{x_i\}$; $\{p_{xi}\}$, $i = \overline{1,N}$

середні величини $\langle x\rangle = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}x_i$; $\langle p_x\rangle = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}p_{xi}$

Відхилення і-го результату $\Delta x_i = -\langle x\rangle + x_i$; $\Delta p_{xi} = -\langle p_x\rangle + p_{xi}$

Вибіркові дисперсії:

$$\langle(\Delta x)^2\rangle = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(\Delta x_i)^2 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(x_i - \langle x\rangle)^2$$

генеральна дисперсія при $N \to \infty$

$$\langle(\Delta p_x)^2\rangle = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(p_{xi} - \langle p_x\rangle)^2$$

Оператор відхилення координати: $\hat{\Delta x} = \hat{x} - \langle x\rangle$

$$\langle(\Delta x)^2\rangle = \langle(\hat{\Delta x}\cdot\hat{\Delta x})\rangle$$

Можна показати, що якщо є два оператори $\hat{F}$ та $\hat{G}$ і $[\hat{F},\hat{G}] = i\hat{M}$, то $\underbrace{\langle(\Delta F)^2\rangle\langle(\Delta G)^2\rangle \geq \frac{1}{4}\langle\hat{M}^2\rangle}$

В нашому випадку $\hat{M} = -\hbar$, тобто дія оператора – множення на константу, => $\langle\hat{M}\rangle = \hbar$; $\langle M^2\rangle = \hbar^2$

$$\langle(\Delta x)^2\rangle\cdot\langle(\Delta p_x)^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

$$\sqrt{\langle(\Delta x)^2\rangle}\cdot\sqrt{\langle(\Delta p_x)^2\rangle} \geq \frac{\hbar}{2}$$

$\Delta x = \sqrt{\langle(\Delta x)^2\rangle}$ – невизначеність координати мікрочастинки

$\Delta p_x = \sqrt{\langle(\Delta p_x)^2\rangle}$ – – // – проекції імпульсу – // –

$$\Delta x\cdot\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

Враховуючи мализну сталої Планка вираз нерідко записують у вигляді

$$\underbrace{\Delta x\cdot\Delta p_x \sim \hbar}_{\text{1927 р, Гайзенберг}}$$

де "~" ≡ "за порядком величини"

~~Часто розподіл~~ Часто імовірність спостереження певних значень фізичної величини f описується розподілом Гауса:

$$\Gamma(f) = \frac{1}{\sigma_f\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{(f-\langle f\rangle)^2}{2\sigma_f^2}\right)$$ – густина імовірності спостереження значення f

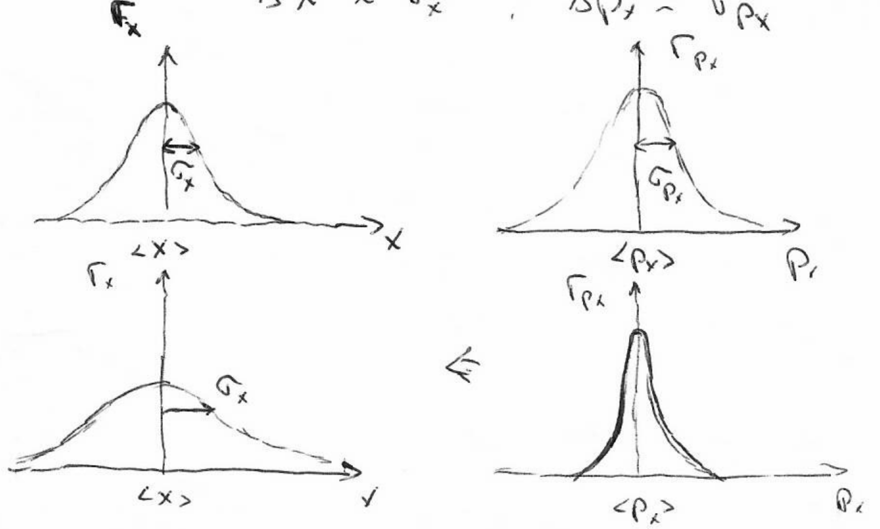
$$\sigma_f^2 = \lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(f_i-\langle f\rangle)^2$$ – генеральна дисперсія

Імовірність того, що f прийме значення в діапазоні $[f_1, f_2]$

$$P([f_1, f_2]) = \int_{f_1}^{f_2} F(f)\,df$$

В нашому випадку, якщо припустити, що к-ть вимірів велика

$$\Delta x \approx \sigma_x \ ; \ \Delta p_x \approx \sigma_{p_x}$$



Якщо змінити прилад, щоб p_x вимірювалось більш точно то

⇒ якщо p_x визначається абс. точно, тобто $\Delta p_x \to 0$, то $\Delta x \to \infty$, тобто визначення координати цим приладом (одночасно з p_x) втрачає сенс.

Аналогічно можна записати

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \sim \hbar$$
$$\Delta z\, \Delta p_z \sim \hbar$$

Можна також довести

$$\Delta E \cdot \Delta t \sim \hbar$$

тобто зменшенні проміжку часу Δt між послідовними вимірюваннями невизначеність енергії системи зростає.

Навіть якщо конструкція приладу принципово дозволяє вимірювати енергію системи без дисперсії, то квантова природа мікрооб'єктів накладає обмеження на такий експеримент (для $\Delta E \to 0$ необх. $\Delta t \to \infty$)

Якщо система перебуває в деякому стані протягом часу T, то зрозуміло, що $\Delta t \le T$

$$T\cdot\Delta E \sim \hbar \qquad \Delta E \sim \hbar/T$$ – принципово точність визначення енергії системи не може бути вища, ця невизначеність наз. шириною рівня.

Квантовий мікроансамбль - ансамбль мікрочастинок, для якого виконуються $\Delta E \cdot \Delta t \sim \hbar$, $\Delta x \cdot \Delta p_x \sim \hbar$, $y \cdot \Delta p_y \sim \hbar$, $z \cdot \Delta p_z \sim \hbar$

Водночас

$$\begin{cases} [\hat{p}, \hat{H}] = 0 & (\text{для вільної частинки}) \\ [\hat{L}^2, H] = 0, \ [\hat{L}_z, \hat{H}] = 0 & (\text{для частинки у центрально-симетричному полі}) \\ [\hat{x}, \hat{t}] = 0 \end{cases}$$

Принцип доповнювальності Бора: динамічні параметри квантових ансамблей можуть бути розділені на дві групи, просторово-часові $(\vec{r}, t)$ та імпульсно-енергетичні $(\vec{p}, E, L^2, L_z)$, які доповнюють одна одну. Не існує кв. ансамблей у яких обидві групи одночасно приймали б певне значення.

Отже, існує два ~~...~~ способи опису мікросвіту $\Leftrightarrow$ корпускулярно-хвильовий дуалізм

- просторово-часовий, коли точно визначаються положення частинок, але втрачається інформація про імпульс та енергію (корпускулярні вл-ті)
- імпульсно-енергетичний, коли втрачає сенс питання про локалізацію частинки (хвильові властивості)

Частинка у центрально-симетричному полі.

Одна з найважливіших задач кв. мех - опис руху електронів у багатоелектронних атомах. Її розв'язок дозволяє з'ясувати різ. вл-ті атомарних систем, визначити основні принципи формування хім. зв'язку у молекулах та електронної структури кристалів.

Основне наближення - центрально-симетричне поле

$$U = U(|\vec{r}|) = U(r) \qquad (U(r) = -e\varphi(r) \text{ для ел-ну})$$

Якщо поле стаціонарне $\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r)\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$ m - маса ел-ну.

В ССК $\Delta(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\{\quad\}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + U(r) = \hat{Q}(r) + \frac{\hat{L}^2(\theta, \varphi)}{2mr^2}$$

$$\hat{Q}(r) = -\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + U(r) \text{ - діє на } r, \ \hat{L}^2 \text{ - на } \theta \text{ та } \varphi$$

$$[\hat{Q}, \hat{L}^2] = 0$$

$$[\hat{H}, \hat{L}^2]\psi = (\hat{H}\hat{L}^2 - \hat{L}^2\hat{H})\psi = \left(\left(\hat{Q} + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2}\right)\hat{L}^2 - \hat{L}^2\left(\hat{Q} + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2}\right)\right)\psi =$$

$$= \hat{Q}\hat{L}^2\psi + \frac{\hat{L}^4}{2mr^2}\psi - \hat{L}^2\hat{Q}\psi - \frac{1}{2mr^2}\hat{L}^4\psi = 0 \Rightarrow [\hat{H}, \hat{L}^2] = 0$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} = \hat{L}_z(\varphi) \qquad \Rightarrow [\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$$

"принцип доповнювальності" стверджує, що хвильова та корпускулярні теорії не є взаємно виключними, а, навпаки, доповнюють одна одну

А отже 1) у центрально симетричному полі $\hat L^2$ та L_z зберігаються
2) $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ є власними ф-ціями $\hat H$:

$$\hat H Y_{lm}(\theta,\varphi) = E\, Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

Y_{lm} визначають кутову залежність $\psi(r,\theta,\varphi)$; і так як r,θ,φ незалежні шукаємо р-к у вигляді $\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\, Y_{lm}(\theta,\varphi)$

радіальна кутова частини.

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}R\,\cancel{Y_{lm}}\right)+\frac{\hat L^2}{2m_0 r^2}RY+U(r)\,R\cdot Y = E\cdot RY$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}Y\frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+R\,\frac{\hat L^2 Y}{2m_0 r^2}+U(r)\cdot R\cdot Y = E\cdot R\cdot Y \quad \times\left(-\frac{r^2}{RY}\right)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{1}{R}\left(\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) - \frac{\hat L^2 Y}{2mY} - U(r)\cdot r^2 = -E\cdot r^2$$

$$\underbrace{\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\big(E-U(r)\big)\cdot r^2}_{r} = \underbrace{\frac{\hat L^2 Y}{2m_0 Y}}_{\theta,\varphi} = Const = C$$

$$\frac{\hat L^2 Y}{2m_0 Y}=C \Rightarrow \hat L^2 Y(\theta,\varphi) = 2m_0\, Y(\theta,\varphi)\cdot C, \quad \text{т.я. } \hat L^2 Y_{l,m} = \hbar^2 l(l+1)Y_{l,m}$$

$$C=\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\big(E-U(r)\big)\,r^2 = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0}$$

$$\boxed{\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+(E-U)\,R\cdot r^2-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0}R=0}$$

р-ня для радіальної частини

Для розв'язку необхідно знати U, тобто $R(r)$ визначається силовим полем; $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$ від поля не залежить, достатньо що те центрально-симетричне.

$l=1,2,\ldots$ для кожного l свої $R_l(r)$ та E_l. Водночас від $m=0,\pm1,\pm2\ldots\pm l$ залежності нема => стани з різним значенням L_z мають однакову енергію, тобто $(2l+1)$ кратно вироджені.

Стани з різними значеннями l прийнято позначати літерами

0	1	2	3	4	5	...
s	p	d	f	g	h	...

тоді: $\partial \to d$ (бо залежності лише від r)

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)=2r\frac{dR}{dr}+r^2\frac{d^2R}{dr^2} \quad ; \times\frac{2m_0}{\hbar^2}$$

$$r^2\frac{d^2R}{dr^2}+2r\frac{dR}{dr}+\frac{2m_0}{\hbar^2}(E-U)\cdot Rr^2-l(l+1)R=0$$

Введемо нову ф-ю $\chi(r)$: $R(r)=\frac{\chi(r)}{r}$

$$R' = \frac{\chi'(r)}{r}-\frac{\chi}{r^2} = \chi' r^{-1}-\chi r^{-2};$$

$$R'' = \frac{\chi''}{r}-\frac{\chi'}{r^2}-\frac{\chi'}{r^2}+\frac{2\chi}{r^3} = \frac{\chi''}{r}-\frac{2\chi'}{r^2}+\frac{2\chi}{r^3}$$

$$r^2\left(\chi'' r^{-1} - 2\chi' r^{-2} - 2\chi r^{-3}\right) + 2r\left(\chi' r^{-1} - \chi r^{-2}\right) +$$
$$+ \frac{2m_0}{\hbar^2}(E-U)\cdot r^2 \frac{\chi}{r} - l(l+1)\frac{\chi}{r} = 0$$

$$\chi''\cdot r + \frac{2m_0}{\hbar}(E-U)\chi\cdot r - l(l+1)\frac{\chi}{r} = 0$$

$$\chi'' + \frac{2m_0}{\hbar^2}(E-U)\chi - \frac{l(l+1)}{r^2}\chi = 0$$

$$\chi'' + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left[E - \left(U + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0 r^2}\right)\right]\chi = 0$$

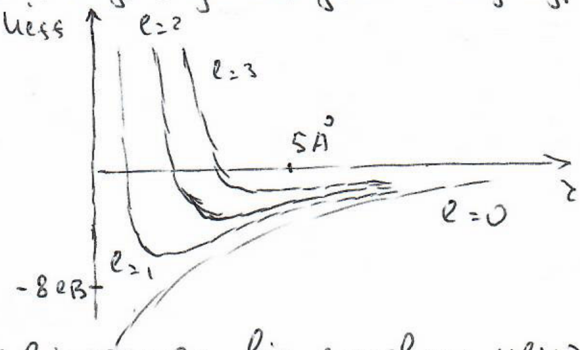
$U_{eff}(r) = U(r) + \underbrace{\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0 r^2}}$ – ефективна енергія ел-на у центрально-симетричному полі

відцентрова енергія, додатня, описує відштовхування від ядра

λ $U(r) = -\dfrac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$

(кулонівське поле)

$$r_{min} = \frac{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2 l(l+1)}{Ze^2 m_0}$$



Я поведінку R при малих відстанях від силового центру $(r\to 0)$

Припустимо, що $\lim\limits_{r\to 0}(r^2\cdot U(r)) = 0$, тобто $U \sim r^{-n}$, $n<2$

Тоді при $r\to 0$, $U(r) \ll \dfrac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0 r^2}$; $E \ll \dfrac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0 r^2}$

$$\chi'' - \frac{l(l+1)}{r^2}\chi = 0$$

шукаємо розв'язок у вигляді $\chi(r) = A\cdot r^s$

$\chi' = A\cdot s\, r^{s-1}$; $\chi'' = A\, s(s-1)\, r^{s-2}$

$$A\, s(s-1)\, r^{s-2} - l(l+1)\cdot A\, r^{s-2} = 0$$

$$s^2 - s - l(l+1) = 0$$

квадратне р-ня $s_1 = -l$, $s_2 = (l+1)$

т.я. $l \geq 0$ (див. вл. зн. $\hat{L}^2$), а також R при $r\to 0$ має бути скінченною,

то $s = (l+1)$

$\chi = A\cdot r^{l+1}$; $R(r) = A\cdot r^l$ (при $r\to 0$)

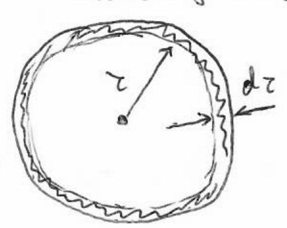
ймовірність перебування ел-на в одиниці об'єму

$$|\Psi|^2 dV = |R(r)|^2 |Y_{l,m}(\theta,\varphi)|^2\cdot r^2 \sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi$$

$\int\limits_0^\infty\int\limits_0^{2\pi}\int\limits_0^{\pi} |\Psi|^2 dV = 1$, т.я. $Y_{l,m}$ – ортонормовані, то

$$\int\limits_0^\infty |R(r)|^2\cdot r^2\, dr = 1.$$

Ймовірність перебування ел-на в точці в тонкому сферичному прошарку товщиною dr на відстані r від центру



$$dP_r = |R(r)|^2 r^2 dr \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} |Y_{l,m}(\theta,\varphi)|^2 \sin\theta \, d\theta \, d\varphi = |R|^2 r^2 dr$$

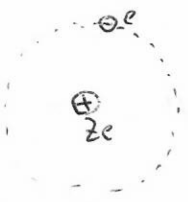
в одиниці об'єму прошарку

$$dP_V = \frac{dP_r}{4\pi r^2 dr} = \frac{|R(r)|^2}{4\pi}$$

при $r \to 0$ $\quad dP_V = \frac{A^2}{4\pi} r^{2l}$, при $l > 1$ $dP_V \to 0$

а для s-електронів густина ймовірності знаходження на силовому центрі (атомному ядрі) відмінна від нуля

Частинка у кулонівському полі



$$U(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$; $Z = 1$ - атом H, $Z > 1$ - воднеподібні

Р-ня для радіальної частини хвильової ф-ї

$$r^2 \frac{d^2R}{dr^2} + 2r\frac{dR}{dr} + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right) r^2 R - l(l+1)R = 0$$

Позначимо $A \overset{def}{=} \frac{2m_0}{\hbar^2}E$; $B \overset{def}{=} \frac{m_0}{\hbar^2}\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}$

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \left(A + \frac{2B}{r}\right)R - \frac{l(l+1)}{r^2}R = 0$$

Розглянемо випадок, коли $E < 0 \Rightarrow A < 0$, позначимо $r_0 \overset{def}{=} \frac{1}{\sqrt{-A}}$

і введемо нову безрозмірну змінну $\rho = \frac{2r}{r_0}$

$$r = \frac{r_0}{2}\rho; \quad \frac{d}{dr} = \frac{d\rho}{dr}\frac{d}{d\rho} = \frac{2}{r_0}\frac{d}{d\rho}, \quad \frac{d^2}{dr^2} = \frac{4}{r_0^2}\frac{d^2}{d\rho^2}$$

$$\frac{4}{r_0^2}\frac{d^2R}{d\rho^2} + 2\,\frac{2}{r_0\rho}\cdot\frac{2}{r_0}\frac{dR}{d\rho} + \left(-\frac{1}{r_0^2} + 2B\frac{2}{r_0\rho}\right)\cdot R - \frac{l(l+1)}{r_0^2\rho^2}\cdot 4R = 0 \quad \times\left(\frac{r_0^2}{4}\right.$$

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho} + \left(-\frac{1}{4} + \frac{Br_0}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)R = 0$$

$$n \overset{def}{=} B\cdot r_0 = \frac{B}{\sqrt{-A}}$$

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho} + \left(-\frac{1}{4} + \frac{n}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)R = 0$$

$R(\rho)$ має бути скінченною як при $r \to 0$, так і при $r \to \infty$

при $r \to 0$ $\quad R(r) \sim r^l \Rightarrow R(\rho) \sim \rho^l$

при $\rho \to \infty$ р-ня спрощується $\frac{d^2R}{d\rho^2} - \frac{R}{4} = 0$

корені цього р-ня $R(\rho) = \exp\left(\pm\frac{\rho}{2}\right)$, для скінченності лишаємо лише "-"

Розвязок шукаємо у вигляді $R(\rho) = \rho^l \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right) W(\rho)$ невідома ф-я

$$\frac{dR}{d\rho} = l\rho^{l-1}\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)W(\rho) + \rho^l\left(-\frac{1}{2}\right)\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)W(\rho) + $$
$$+ \rho^l\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)\cdot W'(\rho) = \rho^{l-1}\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)\left[l\cdot W - \frac{\rho}{2}W + \rho W'\right]$$

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} = (l-1)\rho^{l-2}\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)\left[l\cdot W - \frac{\rho}{2}W + \rho W'\right] +$$
$$+ \rho^{l-1}\left(-\frac{1}{2}\right)\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)\left[l\cdot W - \frac{\rho}{2}W + \rho W'\right] +$$
$$+ \rho^{l-1}\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)\left[l\cdot W' - \frac{1}{2}W - \frac{\rho}{2}W' + W' + \rho W''\right]$$

Підставляємо

$$l(l-1)\rho^{l-2}\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)\cdot W - \frac{1}{2}(l-1)\rho^{l-1}e^{-\frac{\rho}{2}}\cdot W + (l-1)\rho^{l-1}e^{-\frac{\rho}{2}}W' +$$
$$+ l\left(-\frac{1}{2}\right)\rho^{l-1}e^{-\frac{\rho}{2}}\cdot W + \frac{1}{4}\rho^l e^{-\frac{\rho}{2}}\cdot W - \frac{1}{2}\rho^l e^{-\frac{\rho}{2}}\cdot W' + l\rho^{l-1}e^{-\frac{\rho}{2}}W' -$$
$$- \frac{1}{2}\rho^{l-1}\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)\cdot W - \frac{1}{2}\rho^l\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)\cdot W' + \rho^{l-1}\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)W' +$$
$$+ \rho^l\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)W'' + 2l\rho^{l-2}\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)W - \rho^{l-1}\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)W +$$
$$+ 2\rho^{l-1}\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)W' - \frac{1}{4}\rho^l\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)W + n\rho^{l-1}\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)W -$$
$$- l(l+1)\rho^{l-2}\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)W = 0$$

$$\rho^l W'' + (2l+2)\rho^{l-1}W' - \rho^l W' + \rho^{l-2}\left(l(l-1) + 2l - l(l+1)\right)W +$$
$$+ \rho^{l-1}\left\{-\frac{1}{2}(l-1) - \frac{1}{2}l - \frac{1}{2} - 1 + n\right\}W = 0 \qquad \times \frac{1}{\rho^{l-1}}$$

$$\rho W'' + (2l+2-\rho)W' + (n-l-1)W = 0$$

W зручно шукати у вигляді степеневого ряду

$$W(\rho) = \sum_{s=0} a_s\rho^s$$

$$W' = \sum_s s\, a_s\rho^{s-1} \qquad W'' = \sum_s a_s s(s-1)\rho^{s-2}$$

$$\sum_s s(s-1)a_s\rho^{s-1} + \sum_s a_s\cdot s\cdot(2l+2)\rho^{s-1} - \sum_s s\cdot a_s\rho^s + \sum_s a_s(n-l-1)\rho^s = 0$$

$$\sum_s a_s\left(s(s-1) + (2l+2)\cdot s\right)\rho^{s-1} = -\sum_s a_s\cdot\rho^s(n-l-s-1)$$

р-ня буде справедливим при $\forall\rho$ за умови, що коеф. при однакових степенях ρ^s рівні

$$a_{s+1}(s+1)(s+2l+2)\rho^s = -a_s(n-l-s-1)$$

$$a_{s+1} = -a_s\frac{n-l-s-1}{(s+1)(s+2l+2)}$$ – рекурентна ф-ла

$W(\rho)$ – поліноми Лагерра

щоб R однаскінченною при $\rho \to \infty$ необх, щоб ряд був обмежений, тобто має існувати такий номер s_{max}, щоб $a_{s_{max}} \neq 0$, а $a_{s_{max}+1} = 0$ =>

$$n - l - s_{max} - 1 = 0 \Rightarrow$$

1) n має бути цілим додатнім числом, ~~...~~ $n > 0$, наз головне квантове число (при $s_{max} = 0$, $n = l+1$, $l = 0, 1, 2 \ldots$)

2) т.я. $s = 0, 1, 2 \ldots$ $n \geq l + 1$, $\boxed{l \leq n-1}$

$$n = \frac{B}{\sqrt{-A}}; \qquad -A = \frac{B^2}{n^2}; \qquad -\frac{2m_0}{\hbar^2}E = \left(\frac{m_0^{\,?} Z e^2}{\hbar^2 4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \frac{1}{n^2}$$

$$\boxed{E = -\frac{m_0 Z^2 e^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\frac{1}{n^2}}$$ енергія електрона у кулон. полі визначається тільки головним квантовим числом

тобто стани вироджені по l (це виродження знімається у іншому, не кулонівському, центральному полі) та по m, енергії E_n відповідає N станів $N = \sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2$

Якщо ще врахувати виродження по спіну, то $N = 2n^2$

Якщо $E > 0$, то спектр неперервний і нескінченно вироджений

$$r_0 = \sqrt{-\frac{1}{A}} = \sqrt{-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{1}{E}} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}{m_0 Z^2 e^4}n^2} = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_0 Z e^2}n$$ при $Z = 1$, $n = 1$, $r_Б = r_0$ – борівський радіус.

Радіальна частина залежить від n та l : $R = R_{nl}(r)$

$$R_{nl}(\rho) = \rho^l \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)\sum_{s=0}^{n-l-1} a_s \rho^s$$

$$R_{nl}(r) = \left(\frac{2r}{r_{0,n}}\right)^l \exp\left(-\frac{r}{r_{0,n}}\right)\sum_{s=0}^{n-l-1} a_s \left(\frac{2r}{r_{0,n}}\right)^s \qquad a_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi r_Б^3}}$$

$R_{10} = a_0 \exp\left(-\frac{r}{r_Б}\right)$ a_0 – з умови нормування $R(r)$

Отже хвильова ф-я електрона у кулонівському полі

$$\Psi_{nlm} = R_{nl}(r)\, Y_{lm}(\Theta, \varphi)$$

n, l, m – цілі числа, визначають....

Ψ_{nlm} ще називають атомною орбіталлю (тобто атомна орбіталь – це хвильова ф-я одноелектронного стану у центрально-симетричному полі, яка визначається трійкою одноелектронних квантових чисел n, l та m.

Ймовірність знайти ел-н в dV $dP_{r,\theta,\varphi} = |\Psi|^2 dV = |R_{nl}|^2 r^2 dr\, |Y_{lm}|^2 \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$

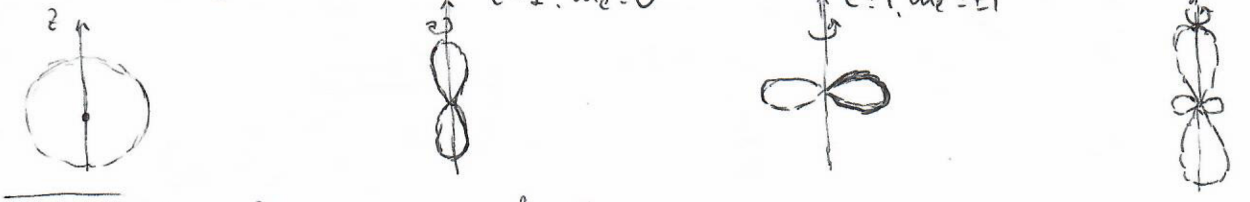
а) якщо проінтегрувати по θ і φ

$dP_r = |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr$ – імовірність того, що ел-н знаходиться в кульовому шарі товщиною dr

к-ть вузлів $= n - l - 1$ => декілька рисунків б) проінтегрувати по r $\Rightarrow dP_{\theta,\varphi} = |Y_{lm}|^2 \sin\theta\, d\theta d\varphi$ — ймовірність, що ел-н буде виявлений в напряму θ, φ (у просторовому куті $d\Omega$)

$Y_{lm} \sim e^{im\varphi} \Rightarrow |Y_{l,m}|^2 \neq f(\varphi) \Rightarrow$ густина ймовірності симетрична відносно осі Oz:

$l=0,\ m=0$ $\quad$ $l=1,\ m_e=0$ $\quad$ $l=1,\ m_e=\pm1$ $\quad$ $l=2,\ m=0$

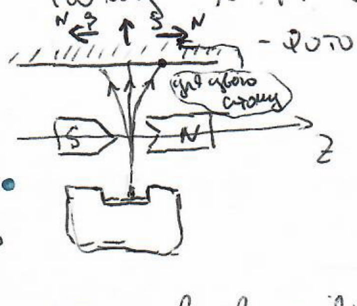


Досліди ~~Отто~~ Штерна та ~~Вальтер~~ Герлаха. Спін електрону

У дослідах (1922) досліджувався рух атомів Ag ($4s^1$) в неоднорідному м.п. Це поле діє, головним чином, на ел-ни атомів, сила

$\vec{F} = -\vec{\nabla} W = \vec{\mu}\,\vec{\nabla}\vec{B}$

при $\vec{B} \parallel Oz$ $\quad F = \mu_z \frac{\partial B}{\partial z}$



- фотопластинка

слід цього атому

В клас. фізиці ел-н завдяки руху навколо ядра характеризується магнітним моментом, причому $\vec{\mu} = -\frac{e}{2m_0}\vec{L}$

отже в квантовій фізиці $\hat{\mu} = -\frac{e}{2m_0}\hat{L}$; $\quad L = \hbar\sqrt{l(l+1)} \Rightarrow$

$\mu = \frac{e}{2m_0}\hbar\sqrt{l(l+1)} = \mu_Б\sqrt{l(l+1)}$ — магнетон Бора

Якщо $\vec{B} \parallel Oz$, то цікавить μ_z

$L_z = \hbar m \Rightarrow \mu_z = \frac{e}{2m_0}\hbar m = \mu_Б \cdot m$

При вимкненому полі — на фотопластинці вузька смуга. Якщо μ_z може бути $\forall$ за рахунок хаотичної орієнтації, то при $B \neq 0$ широка смуга.

$\vec{B}=0$ $\quad$ $\vec{B}\neq0$

без квантування $\quad$ Шредінгер $\quad$ Бор $\quad$ експеримент

Згідно з теорією Шр. при $n=1$, $l=0$, $m=0 \Rightarrow$ без розщеплення; при $n>1$ — непарна к-ть смуг.

В теорії Бора $\mu = \mu_Б \cdot n$ ($n=1,2,3\ldots$) і мало б утворитися 3 смуги (нижня схована)

На експерименті виявилось розщеплення на 2 рівні $\Rightarrow$ в атомі щось не враховується

+ виявлено розщеплення рівнів (крім основного) на підрівні

США $\quad$ 1925, ~~Джордж Юджин~~ Уленбек, ~~Самуель Абрахам~~ Гаудсміт — гіпотеза про те, що ел-н має власний механічний момент (спін), не зв'язаний з рухом в просторі і власний магн. момент.

Спочатку зв'язували з обертанням навколо власної осі, але
1) екваторіальна шв-ть обертання кульки $> c$
2) гіромагнітне співвідношення інше, $\vec{\mu}_s = -\frac{e}{m}\vec{L}_s$

$\Rightarrow$ спін є внутрішньою вл-тю частинки, подібно заряду, масі

не тільки ел-н, але й протон, нейтрон

для південного полюса більша його кола до якого орієнтовані північні полюс ел-на, притягання переважає

$\boxed{1}$ $\boxed{2}$ ... розщеплення ... $(2l+1)$ ... $(1/2)$ ... спін ел-на

f-станів істотно впливає на порядок заповнення одноелектронних підоболонок атомів елементів періодичної таблиці Д.І. Менделєєва.

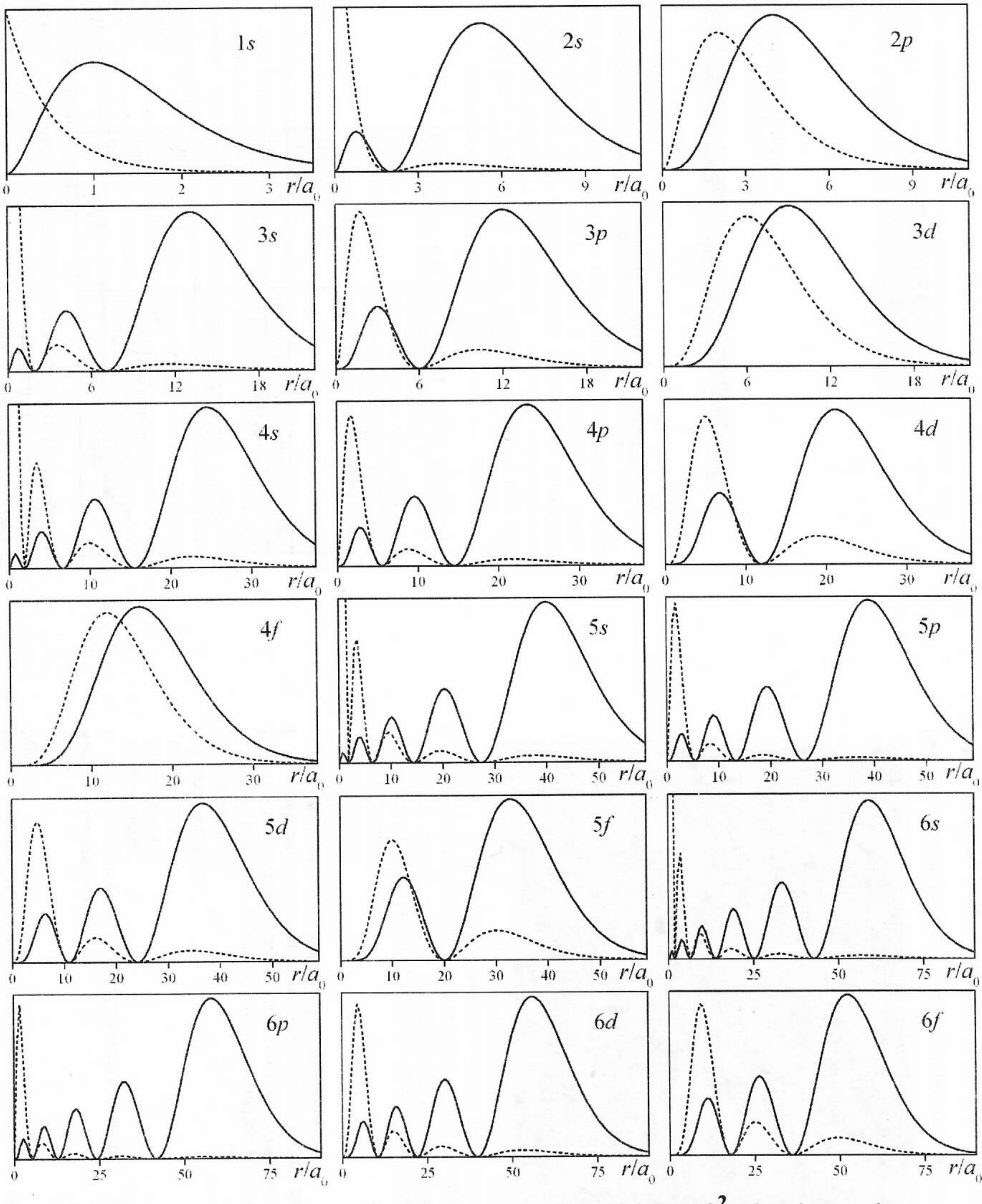


Рис. 11. Залежності густини імовірності $\omega_r(r)$ та $|R(r)|^2$ від відстані до ядра для 1*s*-6*s*, 2*p*-6*p*, 3*d*-6*d* та 4*f*-6*f* одноелектронних станів

Отже, ел-н в атомі має — пов'язані з рухом

1) орбітальний мех. момент $L_\ell^2 = \hbar^2 \ell(\ell+1)$, $L_{\ell z} = m\hbar$

магн. момент $\mu_\ell = \frac{e}{2m_0}\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)} = \mu_Б\sqrt{\ell(\ell+1)}$; $\mu_{\ell z} = \mu_Б m$

2) власний мех. момент, для якого за аналогією

$L_s^2 = \hbar^2 s(s+1)$; $L_{sz} = \hbar m_s$

$\mu_s = \frac{e}{m}\hbar\sqrt{s(s+1)} = 2\mu_Б\sqrt{s(s+1)}$; $\mu_{sz} = \frac{e}{m_0}\hbar m_s = 2\mu_Б m_s$, $m_s = -s, -s+1, \ldots, s$

враховуючи результати Штерна і Герлаха

$2s+1 = 2 \Rightarrow s = \frac{1}{2}$; $m_s = -\frac{1}{2}; \frac{1}{2}$

$L_s = \hbar\sqrt{\frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2}} = \frac{\hbar}{2}\sqrt{3}$; $L_{sz} = \pm\frac{1}{2}\hbar$

$\mu_s = \mu_Б\sqrt{3}$; $\mu_{sz} = \pm\mu_Б$

s - спінове квантове число

m_s - квантове число, яке визначає проекцію спіна.

Спін - поняття повністю квантове і не має класичного аналогу.
В р-ні Шр наявність спіну не враховується, так як у нерелятивістському наближенні електрична вз-я не залежить від спіну => оператор Гамільтона не діє на спінові змінні, а лише на координати і (можливо) на час.

Хвильова ф-я в заг. випадку

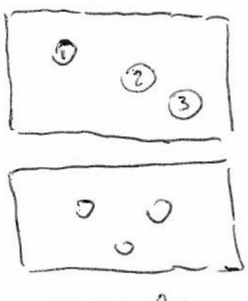
$$\Phi(\vec{r}, m_s) = \Phi_{n\ell m m_s}(\vec{r}, m_s)$$

у спрощеному випадку

$$\Phi(\vec{r}, m_s) = \underbrace{\Psi(\vec{r})}_{\text{коорд. ф-я}}\,\underbrace{\varphi(m_s)}_{\text{спінова ф-я}}$$

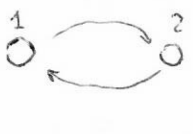
Існують релятивістські р-ня ~~Шредін~~ Шредінгера-Паулі (описує спінову ф-ю) р-ня Дірака (розглядає рух ел-на в 4-просторі)

Принцип нерозрізненості ~~частинок~~ однакових частинок



В клас. механіці однакові частинки (електрони) не зважаючи на їх тотожність не втрачають особистості: їх можна позначити і слідкувати за їх рухом по траєкторії. У кв. мех. завдяки співвідношенню невизначеності слідкувати за кожною частинкою окремо принципово неможливо, а отже вони повністю втрачають свою індивідуальність, перетворюючись на повністю нерозрізненні

Симетрія хвильових ф-й

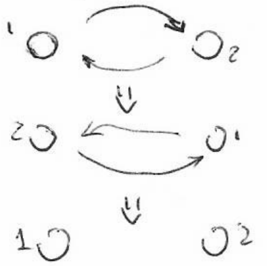


Х система складається з двох частинок

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

краще $\vec{r}_1 \to \xi_1 = (\vec{r}_1, m_{s1})$

Так як частинки точкові, то стани, які утворюються при перестановці частинок повинні бути еквівалентними



$$|\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)|^2 = |\Psi(\vec{r}_2,\vec{r}_1)|^2$$

$$\Psi(\vec{r}_2,\vec{r}_1) = \Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\, e^{i\alpha}$$

α - постійний фазовий множник

Зробимо перестановку ще раз. З одного боку хвил. ф-я системи має відрізнятися від хвил. ф-ї попереднього стану на $\exp(i\alpha)$, а з іншого у нас відтворився той самий початковий стан

$$\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \Psi(\vec{r}_2,\vec{r}_1)\cdot e^{i\alpha} = \Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\cdot e^{i\alpha}\cdot e^{i\alpha} = \Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\, e^{2i\alpha}$$

$$e^{2i\alpha} = 1; \quad e^{i\alpha} = \pm 1 \qquad \boxed{\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \pm\Psi(\vec{r}_2,\vec{r}_1)}$$

По відношенню до перестановки пари частинок хвильова ф-я може бути або симетричною, або антисиметричною

$$\Psi_s(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\dots \vec{r}_i \dots \vec{r}_j,\dots \vec{r}_N) = \Psi_s(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\dots \vec{r}_j \dots \vec{r}_i \dots \vec{r}_N)$$

$$\Psi_a(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\dots \vec{r}_i \dots \vec{r}_j \dots \vec{r}_N) = -\Psi_a(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\dots \vec{r}_j \dots \vec{r}_i \dots \vec{r}_N)$$

Хв. ф-ї усіх станів системи мають мати однакову симетрію, інакше хв ф-я стану, який є суперпозицією станів різної симетрії не буде мати певної симетрії, що неможливо.

Частинки, які описуються антисиметричною хв. ф-єю, мають напівцілі значення S, наз. ферміони, вони підкоряються статистиці Фермі-Дірака (ел-ни, нейтрони, протони)

симетрична - цілі $S(0,1,2..)$, бозони, Бозе-Ейнштейна (фотони)

Хвильова ф-я системи бозонів та системи ферміонів

Розглянемо систему, що складається з N однакових частинок, які не взаємодіють. Позначимо $x = (\vec{r}, m_s)$ - сукупність просторових та спінових змінних, $x_i = \vec{r}_i, m_{s_i}$, $i = \overline{1,N}$

Ж кожна частинка окремо може перебувати в станах (одночастинкових станах), які описуються хвильовими ф-ями

$\cancel{\psi_1(x), \psi_2(x) \dots \psi}$ $\quad \{\psi_p(x)\}$

$p_1, p_2, \dots p_N$ - номери станів окремих частинок. Необхідно записати хв. ф-ю системи $\Psi(x_1, x_2 \dots x_N)$

Оскільки стани незалежні, то можна Ψ шукати у вигляді добутків

$$\Phi(x_1,x_2,x_3,x_4\dots x_N) = \psi_{p_1}(x_1)\psi_{p_2}(x_2)\cdot\dots\psi_{p_N}(x_N)$$

водночас, при перестановці також утворюється ψ-я системи

$$\psi_{p_1}(x_2)\,\psi_{p_2}(x_1)\cdot\dots\cdot\psi_{p_N}(x_N)$$

В заг. випадку хв. ф-ю системи можна записати як суперпозицію добутків $\Psi(x_1, x_2 \dots x_N) = \sum_{\{p_1 \dots p_N\}} C_{p_1 \dots p_N} \psi_{p_1}(x_1)\psi_{p_2}(x_2) \cdot \dots \cdot \psi_{p_N}(x_N)$

причому в одному стані може перебувати декілька частинок
N_1 - к-ть частинок в стані p_1, N_2 - в p_2 ... $N_1 + N_2 + \dots = N$
Перестановки таких частинок в межах стану нового стану системи не породжують, і тому кількість доданків в сумі $\frac{N!}{N_1! N_2! \dots} = K$
Умова нормування $\int |\Psi(x_1, x_2, x_3 \dots)|^2 dx_1 dx_2 \dots dx_N = 1 \Rightarrow$
$\Rightarrow$ множник перед сумою $\left(\frac{N_1! N_2! \dots}{N!}\right)^{1/2}$

а) частинки бозони $\Rightarrow$ Ψ загальна має бути симетричною комбінацією добутків
Якщо бозонів два $\Psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{p_1}(x_1)\psi_{p_2}(x_2) + \psi_{p_1}(x_2)\psi_{p_2}(x_1)]$
В заг. випадку $\Psi(x_1 \dots x_N) = \sqrt{\frac{N_1! N_2! \dots}{N!}} \sum_{\{p_1 \dots p_N\}} \psi_{p_1}(x_1)\psi_{p_2}(x_2) \cdot \dots \cdot \psi_{p_N}(x_N)$

б) частинки ферміони $\Rightarrow$ хв. ф-я антисиметрична
$N=2$ $\Psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{p_1}(x_1)\psi_{p_2}(x_2) - \psi_{p_1}(x_2)\psi_{p_2}(x_1)]$
це можна записати у вигляді det

$$\Psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_{p_1}(x_1) & \psi_{p_1}(x_2) \\ \psi_{p_2}(x_1) & \psi_{p_2}(x_2) \end{vmatrix}$$

перестановка частинок = перестановка стовпчиків

В заг. випадку

$$\Psi(x_1, x_2 \dots x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{p_1}(x_1) & \psi_{p_1}(x_2) & \dots & \psi_{p_1}(x_N) \\ \psi_{p_2}(x_1) & \psi_{p_2}(x_2) & \dots & \psi_{p_2}(x_N) \\ \vdots & & & \vdots \\ \psi_{p_N}(x_1) & \psi_{p_N}(x_2) & \dots & \psi_{p_N}(x_N) \end{vmatrix}$$

- детермінант Слетера

Якщо дві частинки перебувають в однаковому стані ($\psi_{p_i} = \psi_{p_j}$) $\Rightarrow$
$\Rightarrow$ два рядки однакові $\Rightarrow$ визначник $= 0$ $\Rightarrow$ $|\Psi(x_1, x_2 \dots x_N)|^2 = 0$ $\Rightarrow$
імовірність такої події нульова $\Rightarrow$ $N_1 = 1$, $N_2 = 1$ ...
Принцип Паулі: у системі однакових невзаємодіючих ферміонів у кожному одночастинковому стані може перебувати не більше однієї частинки.
В атомі...