

|                |   |         |            |
|----------------|---|---------|------------|
| <u>Глава 1</u> | Атом  | § 1-10  | стр. 1-40  |
| <u>Глава 2</u> | <del>Угнетение</del> и <del>нейтральное</del> рассеяние | § 11-16 | стр. 41-79 |
| <u>Глава 3</u> | Взаимодействие в МП                                     | § 17-19 | стр. 80-91 |
| <u>Глава 4</u> | Двухатомные молекулы                                    | § 20-   | стр. 92-   |

«Лекции

«Квантовая механика»

студентки 4-го курса

группы ФТ-43

Самыховой Ульяны

VII семестр

2Атом

509

2012

§1 Атомное уравнение энергии

В перелом, кв. мес. стая составили  
большая спис урлик шурели, те  
сво-мог изобретов  
можно указать верность распределению  
изобретов

Множество точек

В кв. мер. можно написать ур-е для  
задачи  $3^{\circ}, 4^{\circ}, 11^{\circ}$  - таб. (Вин. каф.  
ур-м. Фадеев (содержит-интересно)  
ур-м.

Атом вращается вокруг центра  
сферически симметрично, т.е. все  
стороны - одинаковы

[illegible]

Стихи о дружбе слабеют и угасают  
с течением времени — 5

Кв. значение  $J$  принимает значения

$$|L - S| < J < L + S$$

нормально уровню с  $L, S$  расщеплен-  
 ные по уровню след. образом:

$$L > S \quad 2S+1$$

$$L < S \quad 2L+1$$

спектральные термы

$L$     0    1    2    3    4    5

$S$

$p$

$D$

$F$

$G$

$H$

sharp    principal    diffuse    fundamental

$$2S+1$$

$$L_j$$

$$2S+1$$

- мультиплетность  
 $J$  - нач. маг. квант.

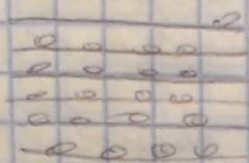
$$^2P_{3/2}$$

$$S = \frac{1}{2} \quad L = 1 \quad J = \frac{3}{2}$$

## §2 Составные электроны атома

Применим квант. запред. фермионам  
наход. в атоме и тем же составными

Есть система дискретных уровней, на  
кот. наход. электроны



Важно если вокруг электр. столкнутся, то  
никого не происходит, т.е. они не перест.  
ют в другое состояние. Т.е. они по-  
добны свободным частицам (квант.  
свободным)  
Электроны движ. вместе с ядром  
и создают поле - самосогласованное -  
(поле, создаваемое всеми частицами)  
Вне квантового электрона - свое само-  
согласованное поле.  
Это поле чист. т.к. атом сфер-сим.

Элементарный момент  
Элементарный момент атома  $L$

$$L = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

Энерг. уровни атома нумеруются главным  
квантовым числом -  $n$

$$n = l + 1,$$

1s 2s 3s

2p 3p

Для того чтоб описать атом, нужно

добавить  $L, S, J$ , и квантовые состояния всех электронов  
 $1s 2p$

состояние сост. всех электронов  
электронная конфигурация

Сост. электронов с квантовыми  $L$  и  $S$ , согласно  
с кратностью  $2(2L+1)$  ( $2L+1$  - по  $l$  маг.  
 $2$  - по проекции спина)

Электр. с квантовыми  $L$  - атомная оболочка

$1s$ -оболочка - макс 2 электрона (наименьшая  
заполненная оболочка)  
заполненная оболочка

$p$ -оболочка - макс 6  $e$

$d$ -оболочка - макс 10  $e$

$f$ -оболочка - макс 14  $e$

$2p^3$  - эквивалентное электронов

Если электронов макс. 6

■ Эмпирическое правило Хунда ("собачье"  
правило)

Наименьшей энергией обладает терм с наибольшим ~~магнетонным~~ возможным при данной электронной конфигурации значением  $S$ , и наибольшим возможным при этом  $S$ , значением  $L$

|     | $m$ | $G$    |
|-----|-----|--------|
| I   | 1   | $1/2$  |
| II  | 0   | $1/2$  |
| III | -1  | $1/2$  |
| IV  | 1   | $-1/2$ |
| V   | 0   | $-1/2$ |
| VI  | -1  | $-1/2$ |

|               | $M_L$ | $M_S$ | $ M_L M_S\rangle$ |
|---------------|-------|-------|-------------------|
| $I+II+III+IV$ | 1     | 1     | $ 11\rangle$      |
| $I+II+III+V$  | 0     | 1     | $ 01\rangle$      |
| $I+II+IV+V$   | 2     | 0     | $ 20\rangle$      |
| $I+II+IV+VI$  | 1     | 0     | $ 10\rangle$      |
| $I+II+V+VI$   | 0     | 0     | $ 00\rangle$      |
| $I+III+IV+V$  | 1     | 0     | $ 10\rangle$      |
| $I+III+IV+VI$ | 0     | 0     | $ 00\rangle$      |
| $I+III+V+VI$  | 0     | 0     | $ 00\rangle$      |

$M_L$  - проекция орбит. мом.  
 $M_S$  - проекция спина

$$M_L = 2m_l$$

$$M_S = 2G$$

$$\begin{array}{l}
 |20\rangle \\
 |10\rangle \\
 |00\rangle
 \end{array}
 \Bigg\} = {}^1D$$

(5)

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 > \\ 0 & 1 > \\ 1 & 0 > \\ 0 & 0 > \end{vmatrix} = \textcircled{3P}$$

$$100 > = \textcircled{1S}$$

$p^4$  может находиться в трех состояниях  $^1D, \textcircled{^3P}, ^1S$

⑥

### §3 Водородоподобные уровни энергии

$$E_n = \frac{m Z^2 e^4}{2 \hbar^2 n^2}$$

He<sup>+</sup>

(ионизирован гелий и является ион)

Li<sup>++</sup>



$$E_n = \frac{m Z^2 e^4}{2 \hbar^2 (n + \Delta_e)^2}$$

$\Delta_e$  — поправка Ридберга

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$$

# §4 Самосопряженное поле

12.09.  
2012

ССТ-поле атомов, кот. состоит из всех  
гастичах (ат. ядер и гастич)

## Метод Карри-Кока

- метод вариационный, т.е. это некое при-  
ближение  
построить ват. фию атома многогастич-  
ной системы.

Атом-система стат.; спектр - дискретный

$$\hat{H}\Psi_n = E_n \Psi_n$$

$$\int d\mathbf{q} \Psi_m^* \Psi_n = \delta_{mn}$$

$\Psi$  - фия, кот. описывает  
состояние, в кот. нах. атом

$$\Psi = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \Psi_n$$

$$\int d\mathbf{q} \Psi^* \Psi = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} a_n^* a_m$$

$$\int d\mathbf{q} \Psi_m^* \Psi_n = \sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 = 1$$

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{q} \Psi^* \hat{H} \Psi &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} a_n^* a_m \int d\mathbf{q} \Psi_n^* \hat{H} \Psi_m = \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} a_n^* a_m \int d\mathbf{q} \Psi_n^* \Psi_m = \sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 E_n \geq E_1 \end{aligned}$$

Все энергии  $E_n \geq E_1$

$E_1$  - мин. энерг.  
в дискр. спектре

$E_1$

Отыскание энергии осн. состояния  $E_1$   
сводится к тому, что мож. найти  
начальную функционал - вариационного

(9)

$$\begin{cases} E_1 = \min \int d\mathbf{q} \psi^* \hat{H} \psi \\ \int d\mathbf{q} \psi^* \psi = 1 \end{cases}$$

- min функционал  
- доп. усл

$$\begin{cases} \delta \int d\mathbf{q} \psi^* \hat{H} \psi = 0 \\ \int d\mathbf{q} \psi^* \psi = 1 \end{cases}$$

- вариационная функция

$$\hat{H} = \sum_k \hat{H}_k + \frac{1}{2} \sum_{k+l} \hat{V}_{kl}$$

$$\hat{H}_k = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_k - \frac{Ze^2}{r_k}$$

$\hat{H}_k$  - гамильтониан электрона  $e^-$ , движущегося в ССГ

$r_k$  - расст. от ядра атома

$\hat{V}_{kl}$  - взаимодействие электрона  $e^-$  с каким-то другим  $e^-$

$$\hat{V}_{kl} = \frac{e^2}{r_{kl}} \quad ; \quad r_{kl} = |\vec{r}_k - \vec{r}_l|$$

Успех вариацион. методов существенно зависит от первоначальной пробной ф-ции (загадка) кот. з-н. кривым приближ. (физ)

использ. итерационный метод.

- Условия:
- 1) волн. ф-ция сконструирована из нек-го одночастичного ф-ции
  - 2) одночаст. ф-ции такие, чтоб энергия нач. состояния была мин
  - 3) для фермионов волн. ф-ция должна быть антисимметрич

10) Выбирает пробную ф-цию:

$$\Psi = \varphi_1(\vec{r}_1) \cdot \varphi_2(\vec{r}_2) \dots \varphi_z(\vec{r}_z)$$

$$\int d^3x_i |\varphi_i(x_i)|^2 = 1$$

Модель независимых гасицу

$$\int d^3r \psi^* \hat{H} \psi = \sum_k \int \psi_k^*(\vec{r}_k) \hat{H}_k \psi_k(\vec{r}_k) d^3r_k + \frac{1}{2} \sum_{k,l} \int d^3r_k d^3r_l \psi_k^* \psi_l^* \hat{V}_{kl} \psi_k \psi_l$$

$$\delta \int dq \psi^* \hat{H} \psi = \int dq \delta \psi^* \hat{H} \psi + \int dq \psi^* \hat{H} \delta \psi = 0$$

$$\delta \int d\eta \psi^* \psi = 0 \quad \int d\eta \delta \psi^* \psi + \int d\eta \psi^* \delta \psi = 0$$

$$\delta \int d^3q \psi^* \hat{H} \psi \rightarrow \int_k \delta \psi_k^* \hat{H}_k \psi_k d^3k +$$

$$+ \int_{k,l} \int d^3k d^3l \delta \psi_k^* \psi_l^* \hat{V}_{kl} \psi_k \psi_l =$$

$\frac{1}{2}$  иссл. т.к. надо варьировать по двум параметрам  
Ф<sub>к</sub> и Ф<sub>г</sub> ~~т.е.~~ т.е. науч. вооруж. вооруж. и  
все сокращу.

$$= \sum_k \delta\varphi_k^* \int d^3x_k \left[ \hat{H}_k + \sum_l \int d^3x_l \varphi_l^* \hat{V}_{kl} \varphi_l \right] \varphi_k = 0$$

$$(*) \int \delta \psi_k^* \int d^3 r_k \left\{ \hat{H}_k + \sum_l \int d^3 r_l \psi_l^* \hat{V}_{kl} \psi_l - \epsilon_k \right\} \psi_k$$

велич.  $\epsilon_k$  наз. <sup>★</sup>пробное значение энергии. Полагая что выраж.  $(*) = 0$ , то  $\star = 0$ .

★ Система связанных интегро-дифференц. ур-ий. В качестве нулевого приближ. используем в/н ф-ии.

$$H_k \psi_k^{(0)} = \epsilon_k^{(0)} \psi_k^{(0)} \quad \text{в/н ф-ии}$$

$\sum_l \int d^3 r_l \psi_l^* \hat{V}_{kl} \psi_l$  — разл. потоки энергии

$$V_k^{(0)}(\vec{r}_k) = \sum_l \int d^3 r_l \psi_l^{(0)*}(\vec{r}_l) \hat{V}_{kl} \psi_l^{(0)}(\vec{r}_l)$$

$V_k^{(0)}$  — среднее значение энергии <sup>нулевое приближ.</sup>  $k$ -го  $\psi$ , со всеми другими  $\psi$  в смысле

$$\left( \hat{H}_k + V_k^{(0)}(\vec{r}_k) - \epsilon_k^{(1)} \right) \psi_k^{(1)}(\vec{r}_k) = 0$$

получили первое приближ.  $\epsilon_k^{(1)} \psi_k^{(1)}$

$$\left( \hat{H}_k + V_k^{(1)}(\vec{r}_k) - \epsilon_k^{(2)} \right) \psi_k^{(2)}(\vec{r}_k) = 0 \Rightarrow \epsilon_k^{(2)} \psi_k^{(2)}$$

Будем решать, пока итерационная величина не будет отличаться меньше, чем на заданную точность

При опред. итераций  $V_k$ ,  $\psi_k$  не уменьшается, поскольку определено с наперед заданной точностью

(12)

$$\hat{V}_k(\vec{r})$$

$$(\hat{H}_k + \hat{V}_k - E_k) \psi_k = 0$$

$\hat{V}_k$  - ССЖ карты (не взаимно, после того интегрируем)  
 Метод Х-Х применим для любого числа частиц, в частности применим для

$E_k$  - собственные значения.

$$E_k = \int d\vec{r} d^3r \psi_k^* \hat{H}_k \psi_k + \frac{1}{2} \int d^3r_k d^3r_l \psi_k^* \hat{V}_{kl} \psi_k$$

$$\hat{V}_{kl} \psi_k \psi_l$$

$$\langle k | \hat{H}_k | k \rangle + \sum_l \langle k | \hat{V}_{kl} | kl \rangle$$

$$\hat{H} = \sum_k \hat{H}_k + \frac{1}{2} \sum_l \hat{V}_{kl}$$

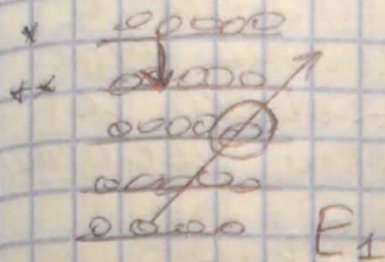
$$E_1 = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle =$$

$$= \sum_k \langle k | \hat{H}_k | k \rangle + \frac{1}{2} \sum_l \langle kl | \hat{V}_{kl} | kl \rangle$$

$$E_1 = \sum_k E_k - \frac{1}{2} \sum_l \langle kl | \hat{V}_{kl} | kl \rangle; \quad (\text{сравним } E_1 \text{ и } E_k)$$

# §5 Рентгеновские термо

Есть сч-мо уровней ко кот. нах. е, брели и ионизировали атом (вошли один из е) образов пустое место - дырка в электронной структуре атома



возможно сост. атома при перех. с \* уровень на (\*\*), атом будет излучать фото. ко. нах. в рентген. спектре, поэтому эти уровни можно назв. рентген. термо.

Рентгеновские термо

1  $S_{1/2}$  2  $S_{1/2}$

2  $P_{1/2}$  2  $P_{3/2}$

1  $S_{1/2}$ , 2  $S_{1/2}$ ; 2  $P_{1/2}$ ; 2  $P_{3/2}$ ; 3  $S_{1/2}$ ; 3  $P_{1/2}$ ; 3  $P_{3/2}$  3d  $3d_{5/2}$  3d  $3d_{3/2}$   
 K L<sub>I</sub> L<sub>II</sub> L<sub>III</sub> M<sub>I</sub> M<sub>II</sub> M<sub>III</sub> M<sub>IV</sub> M<sub>V</sub>

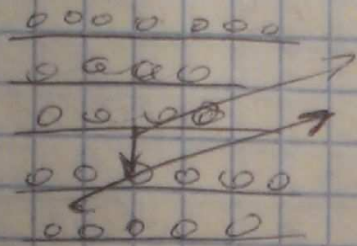
Учет релакс. эффектов приводит к различию между рентген. термами

Пример (L<sub>II</sub> и L<sub>III</sub>) (n, l - один, а j - разные) (M<sub>IV</sub>, M<sub>III</sub>) (разнотипные дублеты (регулярные))

((n, j) - один, а l - разные) - разнотипное нах. ребра - экранированное или иррегулярное дублет. (15)

пример:  $(L_I, L_{II})$   
 $(M_I, M_{II})$

В атоме могут быть безызлучательные  $\bar{e}$



при переходе электр. на ур.в.,  
энергия не излучается, а  
идет на возбуждение еще  
одного  $\bar{e} \rightarrow$  2 дырки и  
2 электрона, такие составили  
примеси, изм.  $2h1p$ .

Эффект Оже, - безызлучательный переход

X [Метод Томаса-Ферми, основанный на  
квазиклассическом приближении]

# Статистический метод Танаса-Ферми

19.09.  
2012

Метод Т-Ф основан на квазиклас.  
приближении.

W(?)

- Воспользуемся квазиклас. приближ.  
т.к. большая часть  $\bar{e}$  (сог. как по  
внешней оболочке) имеют большие  
квантовые числа ( $n$ )
- 1) Т.к. испасы. квазиклас. приближение  
то будем испасы. функцию как  
фичо координата
  - 2) испасы. плотности  $\bar{e}$  <sup>числа</sup> состояний  
в фазовом объеме.

Число состояний  $\bar{e}$  около  $\bar{e}$

$$dN = 2 \frac{d^3 r d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}$$

Число состояний  
в фазовом объеме

умнож на 2,  
т.к.  $\bar{e}$  имеет  
спин и 2 проекции

Нужно узнать завис-ть от  $r$  потому  
 $dN$  пропорц. по  $d^3 p$   $0 \leq p(r) \leq p_0(r)$   
 $0 \leq p(\bar{r})$

$$\int d^3 p = 4\pi \frac{p_0^3(r)}{3} \text{ , потому}$$

$$dN = \frac{p_0^3(r) d^3 r}{3\pi^2 \hbar^3}$$

можно определить, введе плотность  
электронов  $n(\bar{r})$

$$dN = n(\bar{r}) d^3 r$$

(17)

$$(*) \quad n(\vec{r}) = \frac{p_0^3(\vec{r})}{3\pi^2 \hbar^3}$$

Потенц. энергии  $\bar{e}$  в я. я  $-e\varphi(\vec{r})$   
 где  $\varphi$  - электростат. потенц.

$$e \equiv |e|$$

Максим. энергии  $\bar{e}$  в атоме  $-e\varphi_0$ .  
 Совершенно утверждение, что  $-e\varphi_0$  должна  
 быть построение во всем объеме атома.  
 Если бы по атомной теории все  $\bar{e}$  в атоме скла-  
 мось бы в те точки, в кот. потенц. энергии  
 были меньше, а мы знаем, что  $\bar{e}$  были  
 и нигде не скачало, значит наше  
 утверждение верно.

Таким образом энергии  $\bar{e}$  в атоме:

$$\frac{p_0^2}{2m} - e\varphi(\vec{r})$$

Максимальная энергии  $\bar{e}$  в атоме:

$$\frac{p_0^2(\vec{r})}{2m} - e\varphi(\vec{r}) = -e\varphi_0;$$

$$p_0(\vec{r}) = \sqrt{2me[\varphi(\vec{r}) - \varphi_0]}$$

$p_0(\vec{r})$  - подставим в (\*)

$$n(\vec{r}) = \frac{(2me)^{3/2} [\varphi(\vec{r}) - \varphi_0]^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3}$$

Определим электростат. потенциал

$$\Delta\varphi(\vec{r}) = -4\pi\rho(\vec{r})$$

$\rho(\vec{r})$  - плотность  
заряда

$$\rho(\vec{r}) = -en(\vec{r})$$

$$\Delta\varphi(\vec{r}) = 4\pi en(\vec{r})$$

$$\Delta\varphi(\vec{r}) = \frac{4\pi e^{1/2}(2m)^{3/2} [\varphi(\vec{r}) - \varphi_0(\vec{r})]^{3/2}}{3\pi\hbar^3}$$

Пусть атом сферически-симметричен  
тогда остается только радиальная  
часть, а т.к. оператор  $(\Delta)$  дифференци-  
рует его действие ~~не~~ на сферу  
всегда дает 0, поэтому можем  
написать:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} [\varphi(r) - \varphi_0(r)] \right) = \frac{4e(2me)^{3/2} [\varphi(r) - \varphi_0(r)]^{3/2}}{3\pi\hbar^3}$$

уравнение Томаса-Ферми

Надо обобщить переменные, заменим  
 $\chi = \beta z^{-1/3} x$ 
 $\beta = \text{const} = 2 \left( \frac{3\pi}{4} \right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{me^2}$

Сделаем нек. фикс вместо  $(\varphi(r) - \varphi_0)$  e:

$$\varphi(r) - \varphi_0 = \frac{ze^x}{r} \Phi(x)$$

Подставим в уравнение Т-Ф:

(19)

$$\frac{1}{b^3} \frac{ze}{2^{-1/3}} \frac{1}{x^2} \frac{d}{dx} \left( x^2 \frac{d}{dx} \Phi(x) \right) =$$

$$= \frac{4e(2me)^{3/2} z^{3/2} e^{3/2} \Phi(x)^{3/2} b^{3/2}}{b^3 z^{-1/2} x^{3/2} 3\pi \hbar^3}$$

$$\frac{4e(2me)^{3/2} e^{3/2}}{3\pi \hbar^3} \frac{3\pi \hbar^3}{4 m^{3/2} e^3} = 1, \text{ тогда!}$$

$$\frac{1}{x^2} \frac{d}{dx} \left( x^2 \frac{d}{dx} \left( \frac{\Phi'(x)}{x} \right) \right) = \frac{1}{x^2} \frac{d}{dx} \left( \frac{\Phi'(x)}{x} \right) =$$

$$= \frac{1}{x^2} \frac{d}{dx} \left( x^2 \frac{\Phi'(x)}{x} - x^2 \frac{\Phi(x)}{x^2} \right) = \frac{1}{x^2} (x \Phi'(x) + \Phi'(x) - \Phi(x)) =$$

$$= \frac{1}{x} \Phi''(x) \Rightarrow \boxed{x^{1/2} \Phi''(x) = \Phi^{3/2}(x)}$$

$\Phi(x)$  - универсальная функция для всех атомов

На границе атома  $\varphi(R)$  должно быть равно  $\varphi_0$ , т.к. е не могут выйти за пределы атома, то

$$\varphi(R) = \varphi_0 = 0$$

при  $\varphi \rightarrow 0$ , кинетическая энергия стремится к потенциальной энергии электрона

$$\lim_{z \rightarrow 0} [\varphi(z) - \varphi_0] = ze$$

Электрон не может уйти на бескон.  $\boxed{\Phi(0) = 1}$   $\boxed{\Phi(\infty) = 0}$

Условие применимости квазиклассич. приближения

$$\frac{m\hbar(F)}{|p|^3} \ll 1$$

$$F = -\frac{dV(r)}{dr}, \quad V(r) = -\frac{ze^2}{r}$$

сила                      потенциал  
ядра

$$|p| \approx \sqrt{2m|V|} \approx \sqrt{\frac{2mze^2}{r}}$$

$$\frac{m\hbar ze^2 r^{3/2}}{r^2 (2mze)^{3/2} e^3} \ll 1$$

$$\frac{zh}{r^{1/2} (2^{3/2}) m^{1/2} z^{3/2} e} \ll 1$$

$2^{3/2}$  - опускаем, тогда

$$r^{1/2} \gg \frac{\hbar}{m^{1/2} z^{1/2} e}; \quad r \gg \frac{\hbar^2}{me^2 z} \quad \left\{ r \gg \frac{\hbar^2}{me^2} \frac{1}{z} \right.$$

ограничение, со стор.  $r$

При больших  $z$ , де-Бройл. длина волны будет большой

$$\frac{\hbar^2}{2me^2} \ll r \ll \frac{\hbar^2}{me^2}$$

Если  $r >$  боровского радиуса, то мы не можем пользоваться квазикласс. приближ.

$$r \approx \frac{\hbar^2}{me^2} \approx 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ м}$$

$$r_0 = \frac{\hbar^2}{me^4} = 2,42 \cdot 10^{-17} \text{ с} \quad (21)$$

$$C_0 = \frac{me^4}{\hbar^2} \approx 4,36 \cdot 10^{18} \text{ В/м}^2 = [27,21 \text{ В}]$$

# §7 Тонкая структура атомных уровней

$$\vec{L}_k, \vec{S}_k$$

Спин-орбитальное взаимодействие

$$\hat{U}_{\text{сп. орб.}} = \sum_k \chi_k \vec{L}_k \vec{S}_k$$

$\hat{U}_{\text{сп. орб.}}$  — оператор  
сп-орб. взаимодействия

$\vec{S}_j, \vec{S}_k$  — спин-спиновое взаимодействие

Важно усреднить по волновым функциям атома

1) по электр. сост. атома получим оператор, содержащий характеру атома

$$\hat{U} = A \hat{S} \hat{L}$$

2) важно усреднить по состоянию атома с определ.  $S, L, J$

$$\hat{S} + \hat{L} = \hat{J} \quad \hat{S}^2 + 2\hat{S}\hat{L} + \hat{L}^2 = \hat{J}^2 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \hat{S}\hat{L} = \frac{1}{2}(\hat{J}^2 - \hat{S}^2 - \hat{L}^2)$$

$$\hat{S}\hat{L} = \frac{1}{2}(\hat{J}(\hat{J}+1) - S(S+1) - L(L+1))$$

Есть терм, кот. расщеплен на уровни  $S, L$  одинак.  $J$  — разное (мультиплет)

Энергии такого расщепления

(23)

$$E = \frac{1}{2} A J(J+1)$$

Найдем расстояние между соседними

$$\Delta E_{J,J-1} = E_J - E_{J-1} = AJ$$

$$\boxed{\Delta E_{J,J-1} = AJ} \quad \text{Правило интервала Ланде}$$

1) Если  $A > 0$ , то верхний уровень мультиплет,  
 $|L-S| \leq J \leq L+S$   
 верхн. уровень  $-(L+S)$   
 то такой мультиплет по нормальному

2) Если  $A < 0$ , то верхн. уровень  $-|L-S|$   
 мультиплет - обращенный

Если в оболочке находится не более полови-  
 ны макс-возможного для нее числа  $e$ , то

$J = |L-S|$ . Если же оболочка заполнена  
 более, чем на половину, то  
 $J = L+S$

Квадр. <sup>момента</sup> ~~момента~~  $\vec{L}$  и  $\vec{S}$  будут направлены только как квадраты  
 сп-ров  $\vec{L}$  и  $\vec{S}$

$$\vec{J} = B(\vec{L} + \vec{S})^2 \quad E_J = \frac{1}{4} B J^2(J+1)^2$$

(24) B-поправка

$$\begin{aligned}\vec{S}_i &\rightarrow \vec{S} \\ \vec{L}_i &\rightarrow \vec{L} \\ \vec{S} + \vec{L} &= \vec{J}\end{aligned}$$

Схема сложения моментов  
меж. L-S-связь или  
Рассел-Саундеровская связь

$$\begin{aligned}\vec{J}_i &= \vec{S}_i + \vec{L}_i \\ \vec{J}_i &= \vec{J}\end{aligned} \quad \left. \vphantom{\begin{aligned}\vec{J}_i &= \vec{S}_i + \vec{L}_i \\ \vec{J}_i &= \vec{J}\end{aligned}} \right\} \text{ — j-j-связь}$$

# §§ Периодическая система элементов Менделеева

26.09  
2012

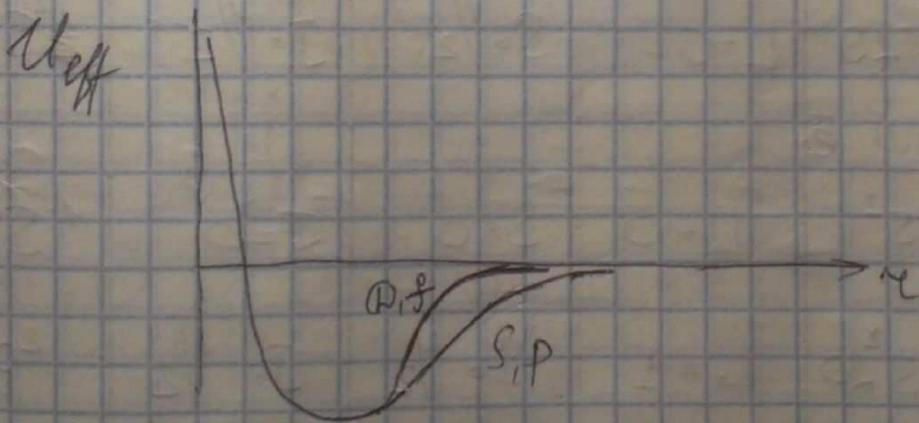
1869 г. — Д. И. Менделеев составил 1-й период. сист. таб.

1921 г. — Нильс Бор объяснил периодичность и получил Ноб. премию

Как объяснить свою периодичность с точки зрения кб. мех.

При переходе атома к соседнему у атома добавляется 1е. Своё состояние зависит от того, сколько е у него на последней незаполненной оболочке.

|            |        |                      |
|------------|--------|----------------------|
| S-оболочка |        | е с отриц. моментами |
| P-оболочка | $\neq$ | 0                    |
| D-оболочка | $\neq$ | 1                    |
| F-оболочка | $\neq$ | 2                    |
|            | $\neq$ | 3                    |



$Z_{eff}$  — потенц. энергия е в атоме

$$Z_{eff} = Z_{кул} + Z_{центробежн}$$

D, f — макс. в глубине атома, они слаб. вылетают на хим. св-ва атома (24)

написаны - не писать  
вспомогательные

|   | 1    | 2    | 3    | 4    | 5    | 6    | 7    | 8    | 9 | 10 |
|---|------|------|------|------|------|------|------|------|---|----|
|   | 1H   | 2He  |      |      |      |      |      |      |   |    |
| 2 | 3Li  | 4Be  | 5B   | 6C   | 7N   | 8O   | 9F   | 10Ne |   |    |
| 3 | 11Na | 12Mg | 13Al | 14Si | 15P  | 16S  | 17Cl | 18Ar |   |    |
| 4 | 19K  | 20Ca | 21Sc |      |      |      |      |      |   |    |
| 5 | 21Cu | 22Zn | 23Ga | 24Ge | 25As | 26Se | 27Br | 28Kr |   |    |
| 6 |      |      |      |      |      |      |      |      |   |    |
| 7 |      |      |      |      |      |      |      |      |   |    |

Терм

|            |        |              |        |            |        |            |        |
|------------|--------|--------------|--------|------------|--------|------------|--------|
| $2S_{1/2}$ | $1S_0$ | $3P_{2,1,0}$ | $3P_0$ | $4S_{3/2}$ | $3P_2$ | $2P_{3/2}$ | $1S_0$ |
| земельный  |        | земельный    |        | спин       |        | спин       |        |

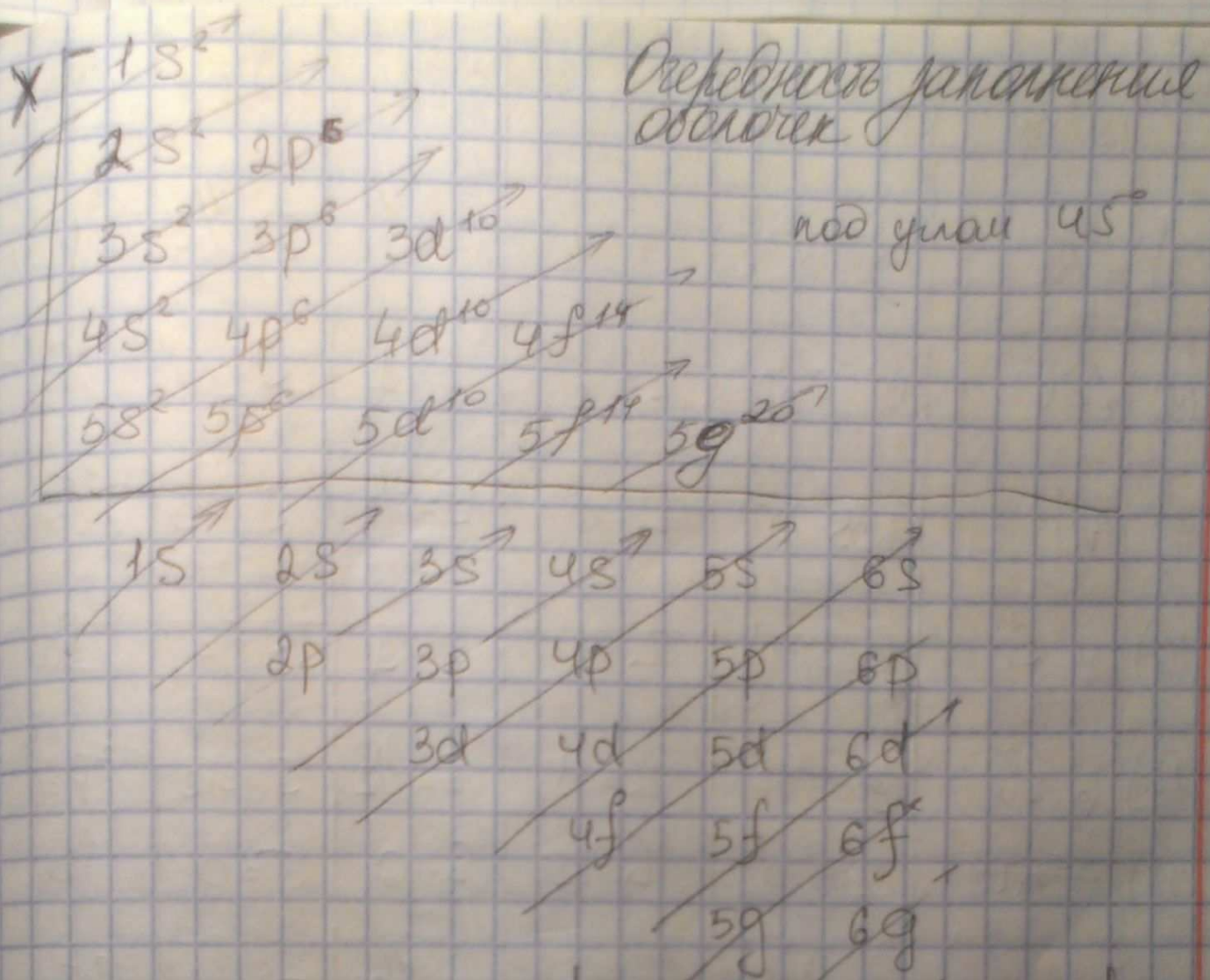
Наимов

Терм

|         |                  |       |         |         |            |
|---------|------------------|-------|---------|---------|------------|
| 1) ① H  | $1S$             | $L=0$ | $S=1/2$ | $J=1/2$ | $2S_{1/2}$ |
|         | ↑                |       |         |         |            |
| 2) 2 He | $1S^2$           | $L=0$ | $S=0$   | $J=0$   | $1S_0$     |
| 3) 3 Li | $1S^2 2S$        | $L=0$ | $S=1/2$ | $J=1/2$ | $2S_{1/2}$ |
|         | ↑                |       |         |         |            |
| 4) 4 Be | $1S^2 2S^2$      | $L=0$ | $S=0$   | $J=0$   | $1S_0$     |
| 5) 5 B  | $1S^2 2S^2 2P$   | $L=1$ | $S=1/2$ | $J=1/2$ | $2P_{1/2}$ |
| 6) 6 C  | $1S^2 2S^2 2P^2$ | $L=1$ | $S=1$   | $J=0$   | $3P_0$     |

ось квант. ↑↑  
↑ 0

прекращение спина. момент не ось квантов



| Элемент                                    | Запис. конфигурация | Окисл. | Число   | Полн    | Терм          |
|--|---------------------|--------|---------|---------|---------------|
| 7) ${}^7\text{N}$<br>↑↑↑<br>1 0 -1         | $1s^2 2s^2 2p^3$    | $L=0$  | $S=3/2$ | $J=3/2$ | ${}^4S_{3/2}$ |
| 8) ${}^8\text{O}$<br>↑↑↑↓<br>1 0 -1        | $1s^2 2s^2 2p^4$    | $L=1$  | $S=1$   | $J=2$   | ${}^3P_2$     |
| 9) ${}^9\text{P}$ ↑↑↑<br>1 0 -1            | $1s^2 2s^2 2p^5$    | $L=1$  | $S=1/2$ | $J=3/2$ | ${}^2P_{3/2}$ |
| 10) ${}^{10}\text{Ne}$ ↑↑↑↑<br>1 0 -1 0 -1 | $1s^2 2s^2 2p^6$    | $L=0$  | $S=0$   | $J=0$   | ${}^1S_0$     |
| 11) ${}^{11}\text{Na}$ *                   | $3s^1$              | $L=0$  | $S=1/2$ | $J=1/2$ | ${}^2S_{1/2}$ |

|                      |                      |       |         |         |             |
|----------------------|----------------------|-------|---------|---------|-------------|
| 12) $_{12}\text{Mg}$ | $(*) 3s^2$           | $L=0$ | $S=0$   | $J=0$   | $^1S_0$     |
| 13) $_{13}\text{Al}$ | $(*) 3s^2 3p^1$      | $L=1$ | $S=1/2$ | $J=1/2$ | $^2P_{1/2}$ |
| 14) $_{14}\text{Si}$ | $(*) 3s^2 3p^2$      | $L=1$ | $S=1$   | $J=0$   | $^3P_0$     |
| 15) $_{15}\text{P}$  | $(*) 3s^2 3p^3$      | $L=0$ | $S=3/2$ | $J=3/2$ | $^4S_{3/2}$ |
| 16) $_{16}\text{S}$  | $(*) 3s^2 3p^4$      | $L=1$ | $S=1$   | $J=2$   | $^3P_2$     |
| 17) $_{17}\text{Cl}$ | $(*) 3s^2 3p^5$      | $L=1$ | $S=1/2$ | $J=3/2$ | $^2P_{3/2}$ |
| 18) $_{18}\text{Ar}$ | $(*) 3s^2 3p^6$      | $L=0$ | $S=0$   | $J=0$   | $^1S_0$     |
| 19) $_{19}\text{K}$  | $(*) 3s^2 3p^6 4s^1$ | $L=0$ | $S=1/2$ | $J=1/2$ | $^2S_{1/2}$ |
| 20) $_{20}\text{Ca}$ | $(*) 3s^2 3p^6 4s^2$ | $L=0$ | $S=0$   | $J=0$   | $^1S_0$     |

|                      |                           |       |         |         |             |
|----------------------|---------------------------|-------|---------|---------|-------------|
| 21) $_{21}\text{Sc}$ | $(*) 3s^2 3p^6 4s^2 3d^1$ | $L=2$ | $S=1/2$ | $J=3/2$ | $^2D_{3/2}$ |
|----------------------|---------------------------|-------|---------|---------|-------------|

группы  
элементов

~~Группа~~ Те элементы, у которых заполнены s, p-оболочки  
 — элементы главных групп  
 — элементы побочных групп  
 — элементы промежуточных групп  
 3d — переходные  
 4d — переходные  
 5d — переходные  
 4f — лантаноиды  
 5f — актиноиды

(30)

| Задан  | конфиг                      | орбит  | смеш             | полн             | терм        |
|--|-----------------------------|--|------------------|------------------|-------------|
| 22) $_{22}\text{Ti}$<br>$\uparrow\uparrow$<br>2 1  | $\star 3d^2$                | $L=3$  | $S=1$            | $J=2$            | $^3F_2$     |
| 23) $_{23}\text{V}$<br>$\uparrow\uparrow\uparrow$<br>2 1 0                                       | $\star 3d^3$                | $L=3$  | $S=3/2$          | $J=3/2$          | $^4F_{3/2}$ |
| 24) $_{24}\text{Cr}$<br>$\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$<br>2 1 0 -1 -2                        | $\star 3s^2 3p^6 4s^1 3d^5$ | One d-orbital<br>$L=0$<br>one s-orbital<br>$L=0$ | $S=5/2$<br>$S=3$ | $J=5/2$<br>$J=3$ | $^7S_3$     |
| 25) $_{25}\text{Mn}$   | $\star 3d^5$                | $L=0$  | $S=5/2$          | $J=5/2$          | $^6S_{5/2}$ |
| 26) $_{26}\text{Fe}$<br>$\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow$<br>2 1 0 -1 -2              | $\star 3d^6$                | $L=2$  | $S=2$            | $J=4$            | $^5D_4$     |
| 27) $_{27}\text{Co}$<br>$\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$<br>2 1 0 -1 -2 -1 | $\star 3d^7$                | $L=3$  | $S=3/2$          | $J=9/2$          | $^4F_{9/2}$ |
| 28) $_{28}\text{Ni}$   | $\star 3d^8$                | $L=3$  | $S=1$            | $J=4$            | $^3F_4$     |
| 29) $_{29}\text{Cu}$   | $\star 3s^2 3p^6 4s^1 3d^9$ | $L=0$  | $S=1/2$          | $J=1/2$          | $^2S_{1/2}$ |
| 30) $_{30}\text{Zn}$   | $\star 3d^{10} \oplus$      | $L=0$  | $S=0$            | $J=0$            | $^1S_0$     |
| 31) $_{31}\text{Ga}$   | $\oplus 4p$                 | $L=1$  | $S=1/2$          | $J=1/2$          | $^2P_{1/2}$ |
| 32) $_{32}\text{Ge}$   | $\oplus 4p^2$               | $L=1$  | $S=1$            | $J=0$            | $^3P_0$     |

|                        |               |       |         |         |               |
|------------------------|---------------|-------|---------|---------|---------------|
| 33) ${}_{33}\text{As}$ | $\oplus 4p^3$ | $L=0$ | $S=3/2$ | $J=3/2$ | ${}^4S_{3/2}$ |
| 34) ${}_{34}\text{Se}$ | $\oplus 4p^4$ | $L=1$ | $S=1$   | $J=2$   | ${}^3P_2$     |
| 35) ${}_{35}\text{Br}$ | $\oplus 4p^5$ | $L=1$ | $S=1/2$ | $J=3/2$ | ${}^2P_{3/2}$ |
| 36) ${}_{36}\text{Kr}$ | $\oplus 4p^6$ | $L=0$ | $S=0$   | $J=0$   | ${}^1S_0$     |

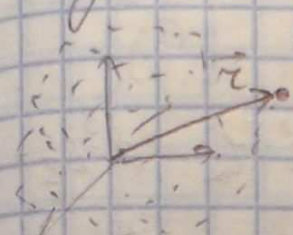
## §9 Многочастичные моменты

3.10.  
2012

Если есть система зарядов то кроме потенциалов  
и потенциалов электрического поля

В кв. мех. должны заменить величину  
операторов  
В клас. мех. электростат. потенц. системы  
зарядов.

$$\varphi(\vec{r}) = \sum_{\alpha=1}^Z \frac{e_{\alpha}}{|\vec{r} - \vec{r}_{\alpha}|} \quad \begin{array}{l} e_{\alpha} - \text{зарядового } e \\ \vec{r}_{\alpha} - \text{радиус-вектор} \\ \text{от } O \end{array}$$



нач. коорд. внутри  
системы

Условно рассматриваем на расстояниях  
мат. больше характер. размеров

Если рассматриваем больше то электростат. потенц.  
можно разложить в ряд

Q-полный заряд системы

$$Q = \sum_{\alpha=1}^Z e_{\alpha}$$

$$\varphi(\vec{r}) \approx \frac{Q}{r} + \frac{\vec{d} \cdot \vec{r}}{r^3} + \frac{1}{6} \sum_{j,k} Q_{jk} \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_k} \frac{1}{r} + \dots$$

$\vec{d}$  - дипольный  
момент

$$\vec{d} = \sum_{\alpha=1}^Z e_{\alpha} \vec{r}_{\alpha}$$

$Q_{jk}$  - тензор квадрупольного момента

$$Q_{jk} = \sum_{\alpha=1}^Z e_{\alpha} [3x_j^{(\alpha)} x_k^{(\alpha)} - \delta_{jk} r_{\alpha}^2]$$

Добав. след. выразимся, чтоб  $\sum_j Q_{jk} = 0$ .

(33)

$\sum_k Q_{kk} = 0$ ;  $Q_{jk} = Q_{kj}$ , т.е. тензор симметричен

Мы работаем в коор. представлении  $\vec{r} = \vec{r}$

Состояние системы опис. волновой функцией, т.е. мы все еще интересуем. матриц. элементами оператора

$\langle \psi_f | \hat{d} | \psi_i \rangle$  матриц. элемент дипольного момента

$$\langle \psi_f | \hat{d} | \psi_i \rangle = \sum_{L=1}^{\infty} e_L \int d^3r_1 d^3r_2 \dots d^3r_L \dots d^3r_L \cdot \psi_f^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_L, \dots, \vec{r}_L) \vec{r}_L \psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_L, \dots, \vec{r}_L) \equiv$$

$$\rho_{if}(\vec{r}_L) = \int d^3r_1 d^3r_2 \dots d^3r_{L-1} d^3r_{L+1} d^3r_L \psi_f^*(\dots) \psi_i(\dots)$$

$\rho_{if}(\vec{r}_L)$  — переходная плотность

$f=i \Rightarrow \rho_{ii}(\vec{r}_L) = \rho(\vec{r}_L)$  — собственная плотность

$$\equiv \sum_{L=1}^{\infty} e_L \int d^3r_L \vec{r}_L \rho_{if}(\vec{r}_L)$$

$$\langle \psi_i | \hat{d} | \psi_i \rangle = \sum_{L=1}^{\infty} e_L \int d^3r_L \vec{r}_L \rho(\vec{r}_L) = 0$$

Если ось по которой берем средн. значение то при замене  $\vec{r}_L \rightarrow -\vec{r}_L$ , волн. ф-ция будет меняться, либо поменяется знак, то среднее значение дипольного момента

Если ось

$$\boxed{\langle \psi_i | \hat{d} | \psi_i \rangle = 0}$$

квадр. мом.

$$\langle \Psi_f | \hat{Q}_{jk} | \Psi_i \rangle, \langle \Psi_i | \hat{Q}_{jk} | \Psi_f \rangle$$

1) усредним по состояниям атома с определ. значением полного момента  $\vec{J}(J, M_J)$

т.е. это означает, что <sup>оператор</sup> квадратичного момента может выражаться только  $\Psi_z$  компонентами полного момента

$$\hat{Q}_{jk} = c \left( \hat{J}_j \hat{J}_k + \hat{J}_k \hat{J}_j - \frac{2}{3} \delta_{jk} \hat{J}^2 \right) \quad c - \text{const}$$

- сим. тензор  
второго  
ранга  
с нулевым  $Sp$

Если  $J=0$ , то все комп. тензора = 0

1)  $J=0 \Rightarrow \hat{Q}_{jk} = 0$  (узел)

2)  $J = 1/2 \Rightarrow \hat{J}^2 = \frac{1}{4} \hat{G}^2 = \frac{3}{4}$

$$\hat{J}_j \hat{J}_k + \hat{J}_k \hat{J}_j = \frac{1}{4} (\hat{G}_j \hat{G}_k + \hat{G}_k \hat{G}_j) = \frac{1}{2} \delta_{jk}$$

$$\hat{J}^2 = J(J+1) \quad \hat{Q}_{jk} = 0$$

Вид  $\hat{Q}_{jk}$  : все комп.  $\hat{Q}_{jk}$  не равно нулю только в случае, если  $J \neq 0; J \neq 1/2$ .

Поэтому найдем нормировочную константу

$$Q = \langle \hat{Q}_{zz} \rangle = \langle JJ | \hat{Q} | JJ \rangle$$

квадратичной мом.

$$M_J = J$$

$$\langle JJ | \hat{J}^2 | JJ \rangle = J(J+1)$$

$$\langle JJ | \hat{J}_z | JJ \rangle = J$$

$$Q = 2C \left( J^2 - \frac{1}{3} J(J+1) \right) = \frac{2CJ}{3} (3J - J - 1) = \frac{2CJ}{3} (2J - 1)$$

Если  $J \neq 0$ ;  $J \neq \frac{1}{2} \Rightarrow C = \frac{3Q}{2J(2J-1)}$

$$\hat{Q}_{jk} = \frac{3Q}{2J(2J-1)} \left( \hat{J}_j \hat{J}_k + \hat{J}_k \hat{J}_j - \frac{2}{3} \delta_{jk} \hat{J}^2 \right)$$

при  $J \neq 0$   
 $J \neq \frac{1}{2}$

$$\hat{Q}_{zz} = \frac{3Q}{2J(2J-1)} \left( \hat{J}_z^2 - \frac{1}{3} \hat{J}^2 \right), \quad \text{if } J \neq 0, J \neq \frac{1}{2}$$

Если проекция произвольна

$$\langle J_z \rangle = M, \text{ тогда}$$

$$\langle \hat{Q}_{zz} \rangle = \frac{3Q}{2J(2J-1)} \left( M^2 - \frac{1}{3} J(J+1) \right) \quad \begin{matrix} J \neq 0 \\ J \neq \frac{1}{2} \end{matrix}$$

00

06

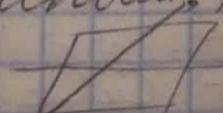
§10 Атом в электрическом поле  
будем рассм. в достаточно слабом поле  
Моган Штарк  
§ Опот Штарка

Поле — малое, по сравнению с внутренним  
полем Я.

$$E_0 = \frac{e}{a_0^2} \approx 5,1 \cdot 10^9 \text{ В/см} \quad (a_0 - \text{радиус первой орбиты})$$

$$E \leq 10^5 \text{ В/см} \leq E_0$$

Если Я слабое, то мы можем пользоваться  
теорией возмущения

Есть возмущенное направи. поле не дает  $\psi_{\text{сим}}$ .  
оно скрывается проекции квантового мо-  
мента по направлению поле  $M_J$   
поправки будут зависеть от кв. числа  
Я будет вызывать возмущение по  
проекции момента, но это сдвиг будет  
не полным, т.к. атом в обрат Я сим.  
напр.  по отношению отосит  
к л-ти, проекция  $M_J$  по напр. поля.

При таком отражении  $M_J$   
меняет знак.

Если  $M_J \neq 0$ , то уровни будут двукратно  
вырожденны, и также вырожденные сдвиг  
не möglich.

Когда мы помещаем систему зарядов  
в Я  $\Rightarrow$  возникает деформация системы  
(поляризуемость), у атомов возникает  
дипольный момент и оператор

возмущение будет оператор бранно <sup>матрица</sup>  
 атомом и дипольным моментом  
 ось z направлена в напр. поле.

$$\hat{V} = -\hat{d} \vec{E} \quad \rightarrow \quad \hat{V} = -\hat{d}_z E$$

Т.о., гамильтониан будет

$$\hat{H} = \hat{H}_2 - \hat{d}_z E$$

Вам. ф-ии атома <sup>определ. квантовыми</sup>  
 в/ф. многоэлектронного атома  
 в кулонов приближении <sup>(n, l)</sup>

$$\Psi_{n,l}(\vec{r}) = \sum_{n=-l}^l c_n \Psi_{n,l,m}^{(0)}(\vec{r})$$

$\Psi_{n,l,m}$  — базисные  
 волновые ф-ии

поправка будет равна 0 т.к.  $\langle \hat{d}_z \rangle = 0$   
 для таких в/ф.

Поправку следует искать во втором приближении  
 теории возмущения

$$\Delta E_n = - \sum_m' \sum_{ik} \frac{(d_i)_{nm} (d_k)_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} E_i E_k$$

$$L_{ik} = 2 \sum_m' \frac{(d_i)_{nm} (d_k)_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad \text{— тензор поляризуемости}$$

$$\Delta E_n = - \frac{1}{2} \sum_{ik} L_{ik}^{(n)} E_i E_k \quad \text{— (энергия) поправка во втором приближ.}$$

Если напр. по полю

$$\Delta E_n = - \frac{1}{2} L_{22}^{(n)} E^2$$

(3.8) Осн. ф-я. смоста — эффект квадратичн по полю

Искривление — атом водорода.  
Этот эффект для водорода минимален по  
полю, д.д.

Четность состояний с опред.  $l = (-1)^l$   
а состояний атомов водорода — вырождена  
по  $l$ , т.е. волн. ф-ые атомов водорода  
не зависят от  $l$ , т.е.

$$\psi_n(r, \vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l C_{lm} \varphi_{nlm}(r, \vec{r})$$

Если суперпозиция состояний с разными  $l$ ,  
т.е. не опред. четностью, тогда

$$\langle d_z \rangle \neq 0$$

т.е. для водорода, первая поправка  $\neq 0$   
и  $\Delta E_n \sim \epsilon$

Если  $\lambda$  сильное, то есть эффект Рашена-Барра

## Глава 2 <sup>118</sup> Элементарные рассеяние 1000 → упругое и неупругое рассеяние 2012

Задача В рассеянии решается в непрерывном спектре

Можно указ. вероятность того, что частица отклонится на какой-то угол

Источник частиц находится на  $-\infty$ , откуда летит пучок частиц, есть осн., где потенциал  $U \neq 0$ ;

Своб. частица сопост. плоскую волну

$$\psi(\vec{r}) = e^{ikz}$$

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) \quad \text{плотность потока вероятности}$$

$$|\vec{j}_{\text{наб}}| = \frac{i\hbar}{2m} \left( e^{ikz} \frac{\partial}{\partial z} (e^{-ikz}) - e^{-ikz} \frac{\partial}{\partial z} (e^{ikz}) \right) =$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} \left( e^{ikz} \cdot e^{-ikz} \cdot (-ik) - e^{-ikz} \cdot ik \cdot e^{ikz} \right) =$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} (-2ik) = \frac{\hbar k}{m} = v \quad \text{---}$$

Применяя нормировать, так, чтобы плотность потока вероятности во всех по осн. величине была равна скорости.

$$R_{kl}(\chi) \sim \frac{\sin(kz - \frac{\chi}{2})}{k\chi} \Rightarrow A \frac{e^{ikz}}{\chi} + B \frac{e^{-ikz}}{\chi}$$

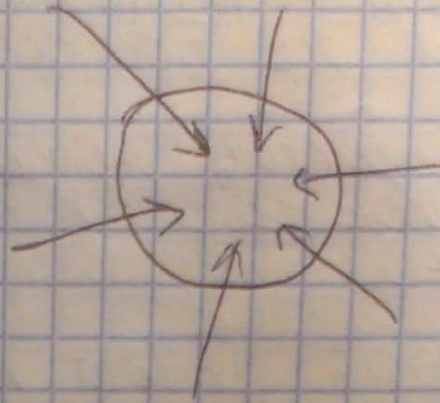
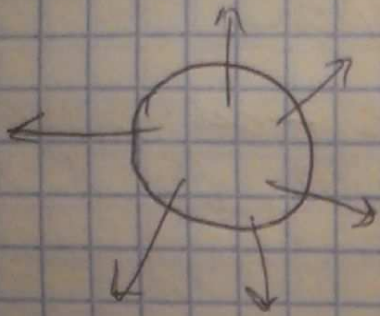
посчитали плотн. потока вероятн

(41)

$$\nabla^2 \left( \frac{e^{ikr}}{r} \right) = \frac{i\hbar}{2m} \left( \frac{e^{ikr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{e^{-ikr}}{r} - \frac{e^{-ikr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{e^{ikr}}{r} \right) =$$

$$= \frac{i\hbar}{2m r^2} \frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial r^2}$$

$$\nabla^2 \left( \frac{e^{-ikr}}{r} \right) = -\frac{v^2}{r^2}$$



$$\frac{e^{ikr}}{r}$$

сферически-расходящееся  
волно

$$\frac{e^{-ikr}}{r}$$

сферически-сходящееся волно

сф-сход. описывает рождение новых частиц  
При  $r \rightarrow \infty$ , в/ф сильно имеет ассиметрию, а в доогаз рассеяния

$$\psi(\vec{r}) = e^{ikr} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$$

$f(\theta)$  амплитуда рассеяния [длина]

Вероятность в со. вращ. из элемент пов-ти

$$J_{\text{рас}} = \frac{v}{r^2} |f(\theta)|^2$$

$$J_{\text{рас}} dS = v |f(\theta)|^2 d\Omega$$

(12)

При описании процесса рассеяния

$$d\sigma = \frac{|f_{\text{рас}}|^2}{|f_{\text{пад}}|^2} \quad \text{— дифференциальное сечение рассеяния}$$

$$d\sigma = |f(\theta)|^2 d\Omega$$

$$\sigma_{\text{барн}} = 10^{-24} \text{ см}^2 = 10^{-28} \text{ м}^2$$

Если ~~зависит~~  $f(\theta)$  зависит только от  $\theta$  и не зависит от азимутального угла,

$$d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$$

и диф. сечение равно

$$d\sigma = 2\pi |f(\theta)|^2 \sin\theta d\theta$$

$$\sigma = \int d\sigma = 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin\theta |f(\theta)|^2$$

граничное условие при заданном рассеянии

Нам нужен наименьшее угол  $\theta$  и наименьшая потенциальная — сферически симметричная  $V(r)$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) \right) - \frac{\vec{L}^2}{2r^2} \psi + \frac{2m}{\hbar^2} [V(r) - E] \psi = 0$$

$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

Волн функцию будем искать в виде разложения по наименьшим леммам

$$\psi = \sum_{l=0}^{\infty} C_l P_l(\cos\theta) R_{kl}(r)$$

$$\vec{L}^2 P_l(\cos\theta) = l(l+1) P_l(\cos\theta)$$

уравнение радиальной части

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR_{kl}}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ V(r) - E - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] R_{kl} = 0$$

$r \rightarrow \infty$   $R_{kl} \sim \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2})}{kr}$  для свободных движений

Если  $V(r) \neq 0$ , то асимптотой будет

$$R_{kl} \sim \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l)}{kr}$$

$\delta_l$  — определ-ся потенциалом.  $\delta_l$  — фаз. рассеяния

Для разл. задач рассеяния нам необходимо будет считать разложение плоской волны по полноволновым лепесткам

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} x^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos\theta)$$

Надо добавить асимптоту  $j_l(kr)$  на больших расстояниях

$$r \rightarrow \infty \quad j_l(kr) \sim \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2})}{kr}$$

Ферми-функция Бесселя

Удобно записать  $j_l(kr)$  в виде суперпозиции бегущих волн

$$r \rightarrow \infty \quad e^{ikz} \approx \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [(-1)^{l+1} e^{-ikr} + e^{ikr}]$$

Запишем асимптотику  $R_{kl}$  •  $P_l(\cos\theta)$

(44)

$$r \rightarrow \infty \quad R_{kl}(r) = \frac{1}{2ikr} [(-i)^l e^{i(kr+\delta_l)} - i^l e^{-i(kr+\delta_l)}]$$

$$\psi \approx \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} C_l [(-i)^l e^{i(kr+\delta_l)} - i^l e^{-i(kr+\delta_l)}] P_l(\cos \theta)$$

$$\psi = e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}; \quad r \rightarrow \infty$$

Волната  $e^{ikr}$  из асимпт. в/ф. и в попер. направлении при сф-расх. волне и будет амплитуда.

Сфер-сход волны в асимптотике быть не должно

Надо, чтоб коэф.  $f$  при сфер-сход волне был = 0.

При сфер-сход волне

$$+i^l e^{-i\delta_l} C_l + (2l+1)(-1)^{l+1} = 0$$

$$i^l e^{-i\delta_l} C_l = (-1)^l (2l+1)$$

$$C_l = i^l e^{i\delta_l} (2l+1)$$

при  $r \rightarrow \infty$

$$\psi \approx \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [e^{i(kr+2\delta_l)} - (-1)^{l+1} e^{-ikr}] P_l(\cos \theta)$$

Амплитуда рассеяния

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [e^{2i\delta_l} - (-1)^{l+1}] P_l(\cos \theta)$$

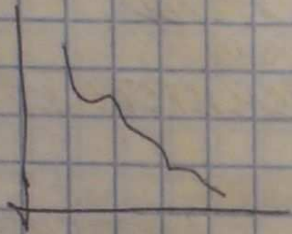
(45)

Разложение амплитуд рассеяния по  
малым параметрам

↑  
формула Факсона - Хольтсмарка

разложение по параметрам валам

$\left\{ \begin{array}{l} e^{2i\delta} \end{array} \right.$  - играет сущ. роль во всех задачах  
рассеяния  
как найти фазу рассеяния  
Важнейший эксперим. данные



расчетная

Фазовый анализ - восстановление фаз по эксперим.  
данным

$$S_l = e^{2i\delta_l}$$

- матричный элем. оператора  
рассеяния в представле-  
нии ортогонального мем.

Введем некот. опер. -  $\hat{S}$  - оператор рассеяния

$$\psi(r) = \hat{S} \varphi(r) \quad \varphi(r) - \text{плоская волна}$$

$$\psi(r) - \varphi(r) = (\hat{S} - 1) \varphi(r)$$

$S_e$  - элем. матр. элем.  $S$  по  $e$

Рассеяние света от  $\hat{S}$

$$|\psi(t=-\infty)|^2 = |\psi(t=+\infty)|^2$$

$$|\hat{S}\psi|^2 = 1 \quad \hat{S}^\dagger \hat{S} = 1$$

$$\psi(t \rightarrow +\infty) = \hat{S} \psi(t \rightarrow -\infty)$$

Важным свойством опер. можно связать с  
коммутированием с лев. оператором

$$\hat{S} = \lim_{\substack{t \rightarrow \infty \\ t_0 \rightarrow -\infty}} \hat{R}(t, t_0)$$

$\hat{R}(t, t_0)$  оператор  
эволюции

$$\hat{R}(t, t_0) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} (t - t_0) \hat{H} \right\}$$

Определим интегральное сечение рассеяния

$$d\sigma = |f(\theta)|^2 d\Omega \quad d\sigma = 2\pi |f(\theta)|^2 \sin\theta d\theta$$

$$\int_0^\pi \sin\theta d\theta P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}$$

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

$$\sigma_l = \sum_L \sigma_L$$

$$\sigma_l = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |S_l - 1|^2$$

$$\boxed{\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l}$$

парциальное  
сечение

$$f(\theta) = \sum_l (2l+1) f_l P_l(\cos\theta)$$

$f_l$  - парциальная  
амплитуда

$$f_l = \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_l} - 1)$$

$$f_l = \frac{1}{2ik} (S_l - 1)$$

$$f_l = \frac{i\delta_l}{k} \sin\delta_l$$

Заметим

$$\sigma_{l_{\max}} = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) - \text{max знач. парц. сечения (46)}$$

## §12 Формулы Борна

17.10.  
2012

Вид. упр. перевод с опред. гранич. на потенциал рассеяния

Важно найти приближ. метод для реш. задачи теории рассеяния малой возмущ. теорией возмущения

Борновское приближение

БП первое приближ. по теории возмущения

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}) + U(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\Delta \psi(\vec{r}) + k^2 \psi(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} U(\vec{r}) \psi(\vec{r})$$

точное упр. перевод, как надо решать с гранич. эти задачи рассеяния будем решать приближ. правая часть мала

$$\Delta \psi(\vec{r}) + k^2 \psi(\vec{r}) = 0$$

$$\psi(\vec{r}) = \psi^{(0)}(\vec{r}) + \psi^{(1)}(\vec{r}) + \dots \quad \text{реш.} \Rightarrow \text{плоские волны}$$

$$e^{i\vec{k}\vec{r}}, e^{-i\vec{k}\vec{r}}$$

$$e^{i\vec{k}\vec{r}} = e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

$$\Delta \psi^{(1)}(\vec{r}) + k^2 \psi^{(1)}(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} U(\vec{r}) \psi^{(0)}(\vec{r})$$

$$\psi^{(1)}(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} (\Delta + k^2)^{-1} U(\vec{r}) \psi^{(0)}(\vec{r})$$

$\psi(\vec{r}) \psi^{(0)}(\vec{r})$  надо разложить по полной  
набору соотв флн опер  $\Delta$   
плоские волны - соотв флн опер  $\Delta$

$$\psi(\vec{r}) \psi^{(0)}(\vec{r}) = \int d^3x e^{i\vec{x}\vec{r}'} \chi(\vec{x})$$

интеграл  
Фурье

$$\chi(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3r e^{-i\vec{x}\vec{r}} \psi(\vec{r}) \psi^{(0)}(\vec{r})$$

$$\psi^{(1)}(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x e^{i\vec{x}\vec{r}} \frac{1}{k^2 - x^2} \chi(\vec{x}) =$$

$$= \frac{2m}{\hbar^2} \int \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3x e^{i\vec{x}(\vec{r}-\vec{r}')} \frac{1}{k^2 - x^2} \psi(\vec{r}') \psi^{(0)}(\vec{r}') d^3r'$$

$$G(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3x e^{i\vec{x}(\vec{r}-\vec{r}')}}{k^2 - x^2}$$

полн  
сума

$$\psi^{(1)}(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3r' G(\vec{r}-\vec{r}') \psi(\vec{r}') \psi^{(0)}(\vec{r}') \quad (*)$$

$$d^3x = x^2 \sin \theta_x dx d\theta_x d\varphi_x$$

$$\int_0^{2\pi} d\varphi_x \int_0^\pi d\theta_x \sin \theta_x e^{i\vec{x}(\vec{r}-\vec{r}') \cos \theta_x} =$$

$$= \int_0^{2\pi} d\varphi_x \int_{-1}^1 dt e^{i\vec{x}(\vec{r}-\vec{r}') t} =$$

$$= \frac{2\pi}{i\vec{x}(\vec{r}-\vec{r}')} [e^{i\vec{x}(\vec{r}-\vec{r}') t} - e^{-i\vec{x}(\vec{r}-\vec{r}') t}]$$

$$G(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^2 i(\vec{r}-\vec{r}')} \int \frac{dx x}{x^2 - k^2} [e^{i\vec{x}(\vec{r}-\vec{r}') t} - e^{-i\vec{x}(\vec{r}-\vec{r}') t}]$$

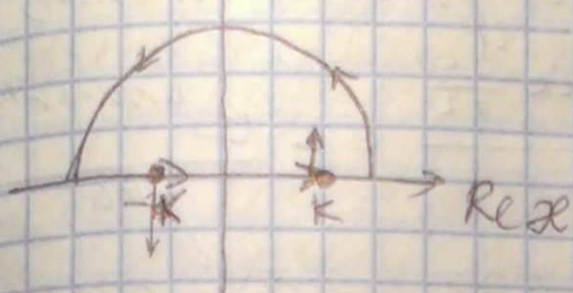
$$\cos \theta_x = t$$

$$-\sin \theta_x d\theta_x = dt$$

$$\frac{1}{t}^{-1}$$

(49)

$$-e^{-i\alpha(\bar{z}-\bar{z}')} = \frac{1}{(2\pi)^2 i(\gamma-\gamma')} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\alpha x}{k^2 - x^2} e^{i\alpha(\bar{z}-\bar{z}')} =$$



$$= \frac{1}{(2\pi)^2 i(\gamma-\gamma')} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\alpha x e^{i\alpha(\bar{z}-\bar{z}')}}{(x-k-i0)(x+k-i0)} = G^+(\bar{z}-\bar{z}')$$

$k \rightarrow k+i0$   $i0$  - бескон. малое велич.

$-k$  - обходящая по  $i0$  вниз (лежит вне контура)  
 $k$  - обходящая по  $i0$  вверх (лежит в контуре)

Свой пучков  $\uparrow\downarrow$  пучком сферически  
 расходятся волну в асимптотике

$\uparrow\uparrow$  - стоячая волна

$\downarrow\downarrow$  - сфер-сход

$$G^+(\bar{z}-\bar{z}') = -\frac{1}{(2\pi)(\gamma-\gamma')} \frac{ke^{ik(\gamma-\gamma')}}{2k} = -\frac{e^{ik(\gamma-\gamma')}}{2\pi(\gamma-\gamma') \cdot 2}$$

$$\boxed{G^+(\gamma-\gamma') = -\frac{e^{ik(\gamma-\gamma')}}{4\pi(\gamma-\gamma')}} \quad \text{для Грина}$$

Для  $\gamma \rightarrow \infty$   $|\bar{z}-\bar{z}'| = \sqrt{\gamma^2 + \gamma'^2 - 2\bar{z}\bar{z}'} \approx$

\*  $\gamma'$  - ограничено, если  $\gamma' >$  значения, то  $1/|\bar{z}'| \rightarrow 0$

$$= r \sqrt{1 - \frac{2\vec{r}\vec{r}'}{r^2} + \frac{r'^2}{r^2}} \approx r \left( 1 - \frac{\vec{r}\vec{r}'}{r^2} + \dots \right)$$

Разложение с точностью до линеарных членов  
по перебору малости

$$G^+(\vec{r}-\vec{r}') = - \frac{e^{i\vec{k}\vec{r} - i\vec{k}\vec{r}'}}{4\pi r} = - \frac{e^{i\vec{k}\vec{r} - i\vec{k}\vec{r}'}}{4\pi r} \quad \text{сфер. распр. волн}$$

$\vec{k}'$  - волновой вектор рассеянной частицы

$$\psi(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3r' G^+(\vec{r}-\vec{r}') U(\vec{r}') e^{i\vec{k}'\vec{r}}$$

$$\psi(\vec{r}) \approx - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{r} \int d^3r' e^{i(\vec{r}-\vec{r}')\vec{r}'} U(\vec{r}')$$

на больших расстояниях

$$r \rightarrow \infty \quad \psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} + f(\theta) \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{r}$$

$$(\vec{k}-\vec{k}') = \vec{q}$$

$\vec{q}$  - передаточный импульс

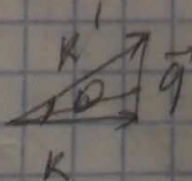
имеет смысл при рассеянии

$$f(\theta) = - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r e^{i\vec{q}\vec{r}} U(\vec{r})$$

Формула Борна  
 $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}'$

первое приближение амплитуды рассеяния

в случае упругого рассеяния  $|\vec{k}| = |\vec{k}'|$



$$q = 2k \sin \frac{\theta}{2}$$

$U(\vec{r}) = U(r)$ , значит в формуле Борна можно сделать интегрирование по углам

$$\left| f(\vec{r}) \right| = \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr' r' \sin q r' U(r') \quad \left. \begin{array}{l} \text{для } \psi\text{-нап} \\ \text{для Борна} \end{array} \right\}$$

Условие применимости борновского приближения

Каждый послед. член мал по сравнению с предыдущим  
Если это условие выполнено, то теория работает

$$|\psi^{(1)}| \ll |\psi^{(0)}|$$

$\psi^{(1)}$  содержит сферическую волну  $\frac{e^{ikr}}{r}$   
чем больше  $r$ , тем меньше  $\psi^{(1)}$

$$r=0 \quad \frac{m}{2\hbar^2} \left| \int d\Omega_{r'} dr' r'^2 U(r') e^{i\vec{k}\vec{r}} \frac{e^{ikr'}}{r'} \right| \ll 1$$

Рассм.  $\psi\text{-нап}$   
можно выполнить интегрирование по углам

$$\frac{m}{(2\pi)\hbar^2} \frac{2\pi}{k} \left| \int_0^\infty dr' U(r') [e^{2ikr'} - 1] \right| \ll 1 \quad \text{у.р.н.}$$

Рассм. 2 случая: случай медл. частицы и случай быстрого движения

Медленные частицы:  $U(r') \neq 0; r' \leq d$   
 $d$  - радиус потенциала

$$kd \ll 1$$

$$e^{2ikr'} \approx 1 + 2ikr' + \dots$$

$$\tilde{U} = \frac{2}{d^2} \left| \int_0^\infty dr r U(r) \right|$$

характ. величина  
порядк. энергии в  
данном случае

$$\tilde{U} = \frac{m}{\hbar^2} \frac{\hbar^2}{md^2}$$

$$\frac{m \tilde{U} d^2}{\hbar^2} \ll 1$$

условие применим. БП. применим для медленных

$$\tilde{E} = \frac{\hbar^2}{2md^2}$$

частиц. энерг. для локализ.  
частицы в обл. пространства  
с мин. размерами  $d$

$$\tilde{U} \ll \tilde{E}$$

Быстрые частицы:  $kd \gg 1$

Если  $kd \gg 1$ , то  $e^{2ikr} \rightarrow$  быстро осред. по  $r$ ,  
вклад в интеграл  $\ll 1$ , значит  $e^{2ikr}$  можно  
пренебречь

$$\bar{U} = \frac{1}{d} \int_0^\infty dr U(r)$$

$$\frac{m \bar{U} d}{\hbar^2 k} \ll 1$$

$$\bar{U} \ll \frac{\hbar^2}{md^2} kd$$

$$\bar{U} \ll \tilde{E} kd$$

Для медл. более жестко

Если БП применимо для медленных, то для  
быстрых частиц оно точно будет применимо  
широко применим, особ. для частиц больших энергий

$$F(\vec{q}) = \frac{f(\vec{q})}{f(0)}$$

форм-фактор

маленькая кол. пруж. рассеяние - не точное

# §13 Рассеяние медленных частиц

24.10.  
2012

уравнение Шредингера с протуп. потенциалом в  
общем виде для рассеяния  
решить нельзя

А для медленных частиц можно решить

$kd \ll 1$ ,  $d$  - радиус действит. потен.

потен. энергии отвлечься от нуля  
если  $r < d$  а если  $r > d$  то потен.  
энергии можно пренебречь

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR_{kl}(r)}{dr} \right) + \left[ k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} V(r) \right] R_{kl}(r) = 0$$

$$\left\{ \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E \right\} \cdot R_{kl}(r) = 0$$

1) Рассм. область  $d \ll r \ll \frac{1}{k}$

при  $r \gg d$  - потен. энергии пренебрегаем

$r \ll \frac{1}{k} \Rightarrow k^2$  - пренебрегаем, тогда

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR_{kl}}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R_{kl}(r) = 0$$

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

Свободное движение

$$R_{kl}(r) = C_1 r^l + C_2 r^{-l-1}$$

Решение  
для области  
 $d \ll r \ll 1/k$

2)  $r \approx \sqrt{l(l+1)}/k$   
В этой обл. существует еще  $r \ll 1/k$

Если, то  $u(r)$  можно возвести

$$R_{kl}'' + \frac{2}{r} R_{kl}' + \left( k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_{kl}(r) = 0$$

В этом одн. решение будет:

$$R_{kl}(r) = A_1 j_l(kr) + A_2 n_l(kr)$$

Константы  $C_1$  и  $C_2$  не зависят от  $k$  и от  $l$

$A_1$  и  $A_2$  - зависят от  $k$ .

Сшиваем решение

Надо сделать  $r$  - маленьким проб  
взять асимптоты финт Бесселя  
и Неймана

$$kr \ll 1 \quad j_l(kr) = (kr)^l / (2^{l+1} l!) !!$$

асимптоты сфер  
фин Бесселя

$$n_l(kr) = - \frac{(2l-1)!!}{(kr)^{l+1}}$$

асимптоты сфер  
фин Неймана

Финт, много тоб одно реш. переходило  
в другое, поэтому брать

$$A_1 = \frac{(2l+1)!!}{k^{l+1}} C_1$$

(тогда при малых  
аргументах - переход)

$$A_2 = - \frac{k^{l+1}}{(2l-1)!!} C_2$$

55) Таким образом сшиваем эти 2 решения

Важно быть ассимптот при больших расст. при сф. расст.

Важно быть ассимптот при больших расст. при сф. расст.

$$f_l(kr) = \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2})}{kr} \quad \text{ассимпт. фнк Бесселя } (kr \gg 1)$$

$$n_l(kr) = \frac{\cos(kr - \frac{l\pi}{2})}{kr} \quad \text{ассимпт. фнк Неймана для } kr \gg 1$$

Важно быть ассимпт при больших расст. при сф. расст.

$$R_l(r) = \frac{(2l+1)!! C_1}{k^{l+1/2}} \sin(kr - \frac{l\pi}{2}) + \frac{k^l C_2}{2(2l-1)!!} \cos(kr - \frac{l\pi}{2}) \quad (\text{ассимпт. волн. фнк})$$

$$R_l(r) = \frac{(2l+1)!! C_1}{2k^{l+1/2}} \left[ \sin(kr - \frac{l\pi}{2}) + \frac{k^{2l+1}}{(2l+1)!!(2l-1)!!} \frac{C_2}{C_1} \cos(kr - \frac{l\pi}{2}) \right]$$

$$\text{коэф. при } \cos(kr - \frac{l\pi}{2}) \text{ обозначим как } \left[ \tan \delta_l = \frac{k^{2l+1}}{(2l+1)!!(2l-1)!!} \frac{C_2}{C_1} \right]$$

Поэтому ассимптот будет след.

$$R_{kl}(r) = \frac{(2l+1)!! C_1}{k^{2l+1} r} \cos \delta_l \left[ \sin \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right) \cos \delta_l + \right. \\ \left. + \cos \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right) \sin \delta_l \right] = \frac{2l+1!! C_1}{k^{2l+1} \cos \delta_l} \frac{\sin \left( kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right)}{kr}$$

$\delta_l$  - фазо-рассеивание,  
если  $k$  - малое, то

$\delta_l$  - малое, тогда

т.е.  $\delta_l$  - меньше по  $\delta_l$  тогда можем  
написать зависимость фазы  $\delta_l$  от  $k$

$$\text{т.е. } \delta_l \approx \delta_l \approx k^{2l+1}$$

$$\boxed{\delta_l \sim k^{2l+1}}$$

Т.к. фаза зависит от энергии, то  $\delta_0$  - самая  
большая,  
а остальные - маленькие.  
Таким образом, для рассеивания медл.  
частиц видна фаза  $\delta_0$  - самая важ-  
ная.

Вспомогательный вопрос. Оне парц. амплитуды  
 $f_l = \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_l} - 1)$

Т.к. фаза мала, то можно разложить  
в ряд, тогда берем первое слагаемое

$$\text{⑤} \quad \frac{f_l}{k} \sim \frac{\delta_l}{k} \sim k^{2l} \quad \text{Зависимость парц. амплитуд от энергии}$$

Амплитуда рассеяния медл. волны

$$\underline{f(\theta) = f_0 = \frac{\delta_0}{k} = \frac{c_2}{c_1} = -a}$$

↑  
ампл. рассеяния  
[a] - размер. ампл.

Сечение медл. волны

$$\left[ \frac{d\sigma}{d\Omega} = |a|^2 \right]$$

- дифференц.  
сечение

$$\left[ \sigma = 4\pi |a|^2 \right]$$

интегральное  
сечение

Сечение медл. волны не зависит  
от энергии и от угла рассеяния

# §14. Рассеяние заряженных частиц в кулоновском поле

Решая задачу в кулоновском приближении, реш. совпадает с точностью до зарядовых множителей, а сечение рассеяния пропорционально зарядовой множитель.

Кулоновский потенциал  $U(r) = \frac{Z}{r}$

$Z$  завис. от зарядовых частиц

$$Z = \pm z_1 z_2 e^2$$

Асимптотическое рассеяние в кулон. прил.

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2 q} \int_0^\infty dr r \sin qr U(r)$$

если подст.  $U(r) = \frac{Z}{r}$  - выраж. \* не имеет смысла

возьмем такую величину:

$$U(r) = \frac{Z}{r} e^{-\gamma r}$$

экранированный кулоновский потенциал (короткодействующий потенциал Юкавы)

$$f(\theta) = -\frac{2mZ}{\hbar^2 q} \int_0^\infty dr r \sin qr e^{-\gamma r}$$

$$= -\frac{2mZ}{\hbar^2 q} \text{Im} \int_0^\infty dr e^{-\gamma r + iqr} = -\frac{2mZ}{\hbar^2 q} \text{Im} \frac{e^{-\gamma + iqr}}{i} \Big|_0^\infty$$

$$= -\frac{2mZ}{\hbar^2 q} \text{Im} \frac{1}{i} = -\frac{2mZ}{\hbar^2 q} \text{Im} \frac{\gamma + i q}{\gamma^2 + q^2} =$$

$$= -\frac{2mZ}{\hbar^2} \frac{q}{\gamma^2 + q^2}$$

$$f(\theta) = \lim_{\theta \rightarrow 0} \left( \frac{2md}{h^2(f^2 + g^2)} \right) = \frac{2md}{h^2 g^2}$$

$$g = 2k \sin \frac{\theta}{2}$$

$$\frac{2md}{2h^2 k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}} = \frac{d}{2mv^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}} \quad \left. \begin{array}{l} \\ \end{array} \right\} \hbar k = p = mv$$

$$\frac{dG}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \frac{md^2}{4h^4 k^4 \sin^4 \frac{\theta}{2}} = \frac{L^2}{4m^2 v^4 \sin^4 \frac{\theta}{2}}$$

$$\frac{dG}{d\Omega} = \left( \frac{L}{2mv^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad \text{— формула Резерфорда}$$

$\frac{L}{mv^2} = \frac{e^2}{mv^2}$   
 не входит  $\hbar$ , значит величина  
 одинакова в класс и в квант  
 механике  
 $[\text{дина}] = \text{const}$ , кон. зависит от измеряемой величины  
 без единиц.  $(\hbar)$

$$mv^2 = 2E$$

$$\frac{dG}{d\Omega} = \left( \frac{L}{4E} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}$$

$\left[ \frac{L}{\hbar v} = n \right]$  безразмерная величина  
 впервые введен Замерфельдом  
 кулоновский параметр (параметр Замерфельда)

$$\frac{dG}{d\Omega} = \left( \frac{n}{2k} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}$$

61) В формуле приот. атом. рассеяние стери во фазовом  
 фазовый множитель важен, когда есть интерференция

$$f_{\text{Кул}}(\theta) = -\frac{L}{2mv^2} \frac{\Gamma(1+in)}{\Gamma(1-in)} \frac{\exp[-2in \ln \sin \frac{\theta}{2}]}{\sin^2 \frac{\theta}{2}}$$

Рассеяние точечного заряда на атоме  
неподеленный заряд.

Рассеяние электронов на атоме.  
рассеяние быстрых элект. атомами, т.е.  
нам надо, чтоб энергия была доста-  
точно велика, чтоб использовать  
эриховское приближение

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2 q} \int_0^\infty dx \cdot x \sin qx \psi(x)$$

Если есть пространств. распредел. зарядов  
то нам надо найти потенциал

$$\psi(r) = e \varphi(r)$$

$\varphi(r)$  — из уравн. Пуассона

$$\Delta \varphi(r) = -4\pi \rho(r)$$

Введем преобраз. Фурье от  $\varphi(r)$

$$\varphi(q) = \int d^3r e^{+i\vec{q}\vec{r}} \varphi(r)$$

прямое преобраз.  
Фурье

$$\varphi(r) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q \varphi(q) e^{-i\vec{q}\vec{r}}$$

обратное  
преобраз. Фурье

$$\rho(q) = \int d^3r \rho(r) e^{i\vec{q}\vec{r}}$$

$$\rho(r) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q \rho(q) e^{-i\vec{q}\vec{r}}$$

подставим в уравн. Пуассона

$$* \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q \psi(q) e^{-i\vec{q}\vec{r}} = -\frac{4\pi}{(2\pi)^3} \int d^3q \rho(q) e^{-i\vec{q}\vec{r}}$$

$$\int d^3q [q^2 \psi(q) - 4\pi \rho(q)] = 0$$

$$\psi(\vec{q}) = -\frac{4\pi}{q^2} \rho(\vec{q}) = -\frac{4\pi}{q^2} \int d^3r \rho(r) e^{i\vec{q}\vec{r}}$$

линейная плотность зарядов ватоме

$$\rho(r) = -en(r) + \quad n(r) - \text{плотность электронов в атоме}$$

$$+ Ze\delta(r)$$

$\delta(r)$  - г.к. дора точечный

Идентифицируем плотность распредел. электронов

$$\int d^3r n(r) = Z$$

$$\psi(q) = \frac{4\pi e Z}{q^2} [Z - F(q)]$$

$$F(q) = \int d^3r n(r) e^{i\vec{q}\vec{r}}$$

$F(q)$  - атомный фактор (характеру распредел.  $e$ )

$$f(q) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r \psi(r) e^{i\vec{q}\vec{r}} =$$

ф.не Борна

$$= -\frac{me^2}{2\pi\hbar^2} \int d^3r \psi(r) e^{i\vec{q}\vec{r}}$$

$$f(q) = \frac{4\pi me^2}{2\pi\hbar^2 q^2} [Z - F(q)] = -\frac{2me^2}{\hbar^2 q^2} [Z - F(q)] =$$

$$\Rightarrow \{ q = 2k \sin \frac{\theta}{2} \}$$

(63)

7.11.2012

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left( \frac{e^2}{2mv^2} \right)^2 \frac{|Z - F(q)|^2}{\sin^4 \theta/2}$$

Форм-фактор

$$F(q) = \int d^3r \rho(r) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}$$

$$F(0) = Z$$

Если возьмем Z, найдем

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left( \frac{e^2 Z}{2mv^2} \right)^2 \frac{|1 - \frac{F(q)}{Z}|^2}{\sin^4 \theta/2}$$

Расс. предельное слагае

1) предположим что  $\rho(r)$  рав. только от  $r$  сферич. симметрия, атом сфер. симметр.

2) Рассечение на малом угле

$$q = 2k \sin \theta/2$$

$$\text{Считаем что } q a_0 \ll 1 \quad \left\{ a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \right\}$$

условие расс. на малом угле

т.к. угол малое, то можем разложить форм-фактор в ряд:

$$F(q) = \int d^3r \rho(r) \left[ 1 + i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \frac{(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})^2}{2} + \dots \right]$$

до квадр  $\frac{q^2 r^2}{6}$

$$d^3r = r^2 dr d\Omega$$

интегр по углу! дает  $4\pi$

$$F(0) = Z \quad \left\{ \int d^3r \rho(r) = Z \right\}$$

$$\vec{r} \cdot \vec{r} = r^2 \cos \theta$$

$$\int_0^\pi d\theta \sin \theta \cos \theta = 0$$

$$2\pi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \cos^2 \theta = \left\{ \cos \theta = t \right. \\ \left. \begin{matrix} -\sin \theta d\theta = dt \\ \frac{1}{3} t^3 + \frac{1}{1} t \end{matrix} \right\} =$$

$$= 2\pi \int_{-1}^1 dt \frac{1}{3} t^3 = \frac{4\pi}{3}$$

$$\int d^3r n(r) \frac{(\vec{r} \cdot \vec{r})^2}{2} = \frac{2}{6} 4\pi \int_0^\infty dr r^4 n(r) =$$

$$\frac{4\pi}{6} \int dr r^4 n(r) = \frac{2}{6} \int d^3r r^2 n(r) =$$

$$= \frac{2q^2 \langle r^2 \rangle}{6}$$

$$F(q) = 2 \left( 1 - \frac{q^2 \langle r^2 \rangle}{6} \right)$$

$$\frac{dS}{d\Omega} = \frac{1}{2m\hbar^2} \left( \frac{2m\hbar^2}{2} \right)^2$$

$$\frac{q^2 \langle r^2 \rangle}{6 \sin^2 \theta/2}$$

$$f(\theta) = -\frac{2m\hbar^2}{\hbar^2 q^2} [2 - F(q)] = -\frac{2m\hbar^2}{\hbar^2 q^2} \left( \frac{2m\hbar^2}{2} \right)^2 \frac{q^2 \langle r^2 \rangle}{6}$$

$$\left( \frac{dS}{d\Omega} = \frac{2m\hbar^2 \langle r^2 \rangle}{3\hbar^2} \right)$$

вспомогательная функция

Среднее значение в области

② рассеяние по больших углах  
 $q_0 \gg 1$

вклад от Р-фактора очень маленький  
также с  $q^2$  экстр. возр.

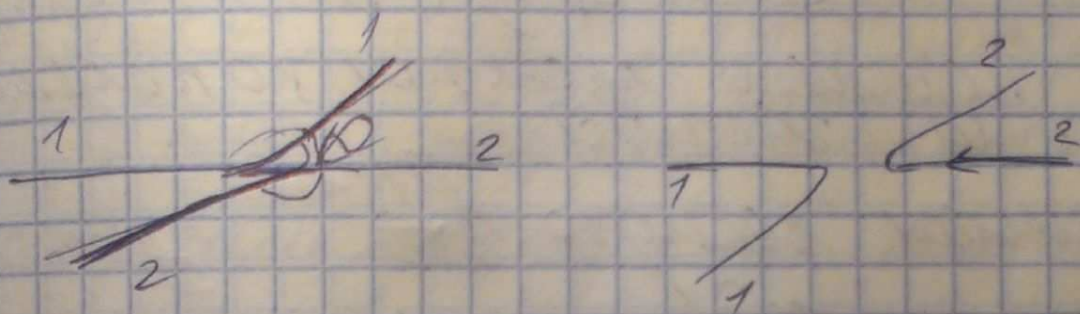
по больших углах — обычное резерфорд-  
овское рассеяние

## § 15 Столкновение тождественных частиц

Тождеств. частицы приводят к появлению ~~одн~~ обменного брашера.

В рассеянии одной частицы по формуле (\*) коэф. обр. частиц тождеств.

Если такое (\*) рассеяние произойдет, то возникает такая картина



Эти 2 картины неразмешивают тожд. частицы

Как будем описывать частицы? В/ф.

Частица, ког. движ. с  $-\infty$  к центру описов. волной  $e^{ikz}$

Частица, ког. движ. с  $+\infty$  к центру описов. волной  $e^{-ikz}$

Надо найти вероят. того, что какая-то из частиц вылетит по угол (телесный) дифференциал рассеяния

Зависит от спинов частиц

$S$  - спин каждой частицы  
 $S$  - суммарный спин

$$\chi_{SM}(1,2) = \sum_{m_1, m_2} (s_{m_1} s_{m_2} / SM) \chi_{s_{m_1}} \chi_{s_{m_2}}$$

спиновая  
часть в/ф.

Коеф. Клебша - Торбана отсюда.

$$(s_{m_1} s_{m_2} / SM) (-1)^{2S-S} / (s_{m_2} s_{m_1} / SM)$$

Если поменять проекции, то поменяем местами частицы.

Напишем формулу в/ф

$$\chi_{SM}(1,2) = \psi_{SM}(1,2) \chi_{SM}(1,2)$$

частицы поменяем местами

$$\psi_{SM}(1,2) = (-1)^{2S} \psi_{SM}(2,1)$$

Если  $S$  - целая, то полная в/ф симметрична  
 Если  $S$  - полуцелая, то полная в/ф антисимметрична

$$\chi_{SM}(1,2) = (-1)^{2S-S} \chi_{SM}(2,1)$$

Отсюда можем найти как меняется  
 коэф. часть в/ф при перестановке

$$\psi_{SM}(1,2) = (-1)^S \psi_{SM}(2,1)$$

коэф. часть в/ф для двух одинаковых частиц  
 зависит от их спинов

В системе ЦМ

перестановка частиц эквивал. инвер-  
сии, т.е.

$$\pi \rightarrow \tau \quad \theta \rightarrow \pi - \theta \quad \varphi \rightarrow \varphi + \pi \quad z \rightarrow \bar{z} - z$$

$$z = r \cos \theta \quad \{ \cos \pi - \theta = -\cos \theta \}$$

$\pi \rightarrow \infty$  пишем асимпт. в/ф. на больших  
расст. в/ф нуль.

$$\psi(\vec{r}) = e^{ikz} + \frac{f(\theta)}{r} e^{ikr} \quad \left( \begin{array}{l} \text{плоская - сфер/раск} \\ \text{при инверсии меняется знак} \end{array} \right) \left[ e^{ikz} + \frac{f(\pi - \theta)}{r} e^{ikr} \right]$$

уточн. часть  $\pm$ , в зав. от симм.

перенос: 2 случая: 1) S-символ, знак +,  
тогда

$$[dG_S = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 d\Omega]$$

тогда 2) S-перетом, знак -

$$[dG_A = |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 d\Omega]$$

$$f(\theta) = -a$$

← асимпт. рассеян. то медл. част.  
а - одно рассеяние

$$dG_S^{(0)} = |a|^2 d\Omega \quad dG_A^{(0)} = 0$$

интерференц. член?

$$dG_S = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 + 2\text{Re}[f(\theta)f^*(\pi - \theta)] d\Omega$$

$$dG_A = |f(\theta)|^2 - |f(\pi - \theta)|^2 - 2\text{Re}[f(\theta)f^*(\pi - \theta)] d\Omega$$

(70)

$$d\sigma_{\text{Krac}} = [ |f(\theta)|^2 - f(\pi-\theta) ] d\Omega$$

В клас. шек нег интерференц. гленов а  
в кв. они поелва.

Есть газпиза <sup>не</sup>  $\gamma$ нах. в опред. стенов<sup>ых</sup>  
составших, т.е. ~~пути~~ <sup>переход</sup> полимеризов<sup>анных</sup>  
по ~~пути~~ <sup>пути</sup>  $\gamma$  ~~состав~~ усреднен по  
стену.

Система  
новорок  
(зогон), то будет

Двух частей имеет  $(2S+1)^2$  спл-  
сост-ид. При этом если  $S = \text{число}$   
спл-сост-ид, то будет  $(S+1)(2S+1) \leftarrow$  с сетом, полным спл-  
 $S$   
 $S(2S+1) \leftarrow$  с сет. полн. спл-ком  $S$

если  $S = \text{полуцелое (фермион)}$ , то будет  $S(2S+1)$  степен. своб. с четн. полным спинном  $S$

и  $(s+1)/(2s+1)$  ступ. соот. с клетч. полином  
степень  $s$

Статистические веса

1) Бозоны ( $S$ -целое)  $\omega_e = \frac{(S+1)}{2S+1} \cdot \omega_0 = \frac{S}{2S+1}$

Стат. вес  
списком

остатки с четным номером

$$w_e^B = \frac{S+1}{2S+1}$$

нечетный

$$w_o^B = \frac{S}{2S+1}$$

Сергей Оле. Яонов

$$dG_B = w_e^B dG_S + w_o^B dG_A \quad \ominus$$

$$dG = \left[ |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 + \frac{2}{2S+1} \operatorname{Re}[f(\theta)f^*(\pi - \theta)] \right] d\Omega = dG_B$$

2) Фермионы ( $S = \text{полуцелый}$ )

в этом случае, стат. вес равен

$$\begin{cases} W_e^F = \frac{S}{2S+1} \\ W_o^F = \frac{S+1}{2S+1} \end{cases}$$

Оме четного полн. спина

Оме нечетного полн. спина

Сечение Оме фермионов

$$dG_F = W_e^F dG_S + W_o^F dG_A$$

$$dG_F = \left[ |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 + \frac{2}{2S+1} \operatorname{Re}[f(\theta)f^*(\pi - \theta)] \right] d\Omega$$

Рассм. примеров расс. тожд. частицы

1)  $L$ -част на  $L$ -част (бозоны)

2)  $\bar{p}$ -протон на протон. (фермионы)

Требуется что есть кинем. рассеяния

$$f(\theta) = -\frac{1}{2mv^2} \frac{\Gamma(1+i\eta)}{\Gamma(1-i\eta)} \frac{\exp(-2i\eta \ln \sin \frac{\theta}{2})}{\sin^2 \frac{\theta}{2}}$$

$$\eta = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v} \quad L$$

(4)  $L-L \quad e^2 Z_1 Z_2 = 2$

(72)

$$L = 4e^2$$

$$n = \frac{4e^2}{\hbar v}$$

$$m = \frac{m_e}{2} \quad \left( \begin{array}{l} \text{пробег} \\ \text{масса} \end{array} \right)$$

$$\left( \frac{dG_{pp}}{d\Omega} \right)^2 = \left( \frac{4e^2}{2mv^2} \right)^2 \left[ \frac{1}{\sin^2 \theta/2} + \frac{1}{\cos^2 \theta/2} + \frac{2 \cos(\ln \ln \frac{2}{\theta/2})}{\sin^2 \theta/2 \cos^2 \theta/2} \right]$$

среднее квант.  
расщепл.  $L$ -зачин.  
не  $L$ -зачин.

② p-p

$$L = e^2$$

$$n = \frac{e^2}{\hbar v}$$

$$m = \frac{m_p}{2} \quad \left( \begin{array}{l} \text{пробег} \\ \text{масса} \end{array} \right)$$

$$\frac{dG_{pp}}{d\Omega} = \left( \frac{e^2}{2mv^2} \right)^2 \left[ \frac{1}{\sin^4 \theta/2} + \frac{1}{\cos^4 \theta/2} - \frac{\cos(\ln \ln \frac{2}{\theta/2})}{\sin^2 \theta/2 \cos^2 \theta/2} \right]$$

1) Медл. распух  $e^2 \gg \hbar v$   $n \gg 1$

(Волновые значения  
отрабатываются)

$$\frac{dG_{pp}}{d\Omega}$$

интерференц. членов убывает, среднее ст-  
близко к классическому.

2) Быстрое распух  $e^2 \ll \hbar v$   
{  $\cos \theta \rightarrow 1$  }

$$\frac{dG_{pp}}{d\Omega} = \left( \frac{e^2}{mv^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \theta}$$

$$\frac{dG_{pp}}{d\Omega} = \left( \frac{e^2}{mv^2} \right)^2 \frac{1+3\cos^2 \theta}{\sin^4 \theta}$$

13

# § 16 Энергия рассеяния при наличии и.и. неупругих процессов 2012

Неупругий процесс — процесс взаимодействия  
 выш. степеней свободы,  
 (часть энергии при столкновении  
 уходит на возбуждение ст. своб.)

Частица а сталкивается с А, при этом могут  
 протекать различные процессы: рождение тех  
 самых частиц и вылет с ними из системы  
 и т.д. (неупругие процессы)

А\* — А в возбужденном состоянии, вылетевшем  
 сст. (т.е. вылетевшем из ст. своб.) — неупругое рассеяние

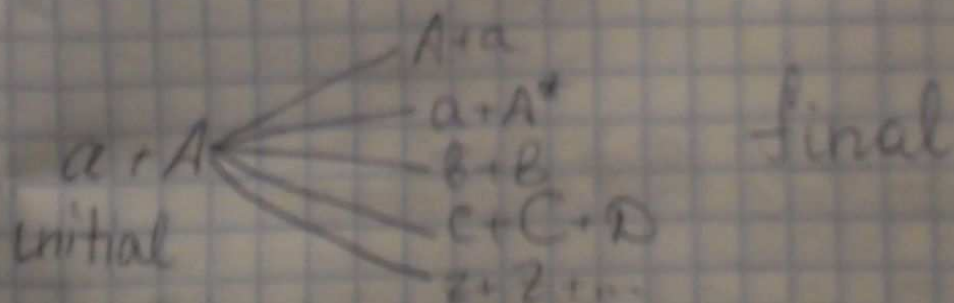
А а — перест. существ. и ст. своб. новые  
 частицы в, в — реакция

$c + C + D$

$z + Z + \dots$

т.е. много различных процессов  
 и комбинаций частиц

Входной канал — как процесс, так и ст. своб.  
 выходной а с А / т.е. т.е. т.е.



Входной канал — энергетический процесс  
 (может быть много)

Наличие неупругих каналов сказ. ссе  
 энергии не упругое рассеяние

$$\eta \rightarrow \infty$$

$$\psi(r) = \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [(-1)^{l+1} e^{-ikr} + S_l e^{ikr}] P_l(\cos \theta)$$

асимпт. в/ф  
на больших расст  
от рассеив. центра

Мож. рассм. случай, когда  
только упругое рассеяние

$$|S_l| = 1$$

$\Rightarrow \delta_l$  - действ. вел.

Если открыт неупругий канал, то

$$|S_l| < 1$$

$\Rightarrow \delta_l$  - комплексное

$$S_l = e^{2i\delta_l}$$

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (S_l - 1) P_l(\cos \theta)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$$

$$\sigma_{el} = \int d\Omega |f(\theta)|^2$$

Воспольз. условием ортонормир. полиномов Лежандра

$$\int_0^\pi d\theta \sin \theta P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}$$

$$\sigma_{el} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1) (S_l - 1)(S_{l'} - 1)^*$$

$$= \frac{1}{(2l+1)} \delta_{ll'}$$

(45)

$$\sigma_e = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |1 - S_l|^{-2} \quad \text{(интер) среднее упругого рассеяния}$$

напр. элемент  $S_{ii}$   $\left\{ \begin{array}{l} \text{в диаг. по кб. числу } l, \text{ когда} \\ \text{всвязующий с некк.} \\ \text{канонами, должна писаться} \\ \text{внутри кб. числа} \\ \text{(жирные, стрелки и т.д.)} \end{array} \right.$

матриц по всем кб. числам канала, поэтому

$$\sigma_e = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |1 - S_{ii}|^{-2}$$

Переход в системе опред  $\psi_f - \psi_i = (\hat{S} - 1)\psi_i$

$$\langle f | \hat{S} - 1 | i \rangle = \hat{S}_{fi} - \delta_{fi} \quad \left\{ \sigma_e = \sigma_{ii} \right\}$$

$$\sigma_{fi} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |1 - \delta_{fi} - \hat{S}_{fi}|^{-2}$$

$\{ 1 - S_{ii} \} \rightarrow \{ \delta_{fi} - \hat{S}_{fi} \}$   
напр. элемент, который диагонален по кб. числу

Среднее рассеяния ( $\sigma_e$ ) суммируется по всем  $i$ , при  $f \neq i$ , т.е. неск. упругое рассеяние

$$\sigma_e = \sum_{f \neq i} \sigma_{fi}$$

$$\sigma_e = \frac{\pi}{k^2} \sum_{f \neq i} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |(\hat{S}_{fi})|^{-2}$$

т.к. оператор рассеяния унитарный  $\sigma_e$

$$\hat{S}^\dagger \hat{S} = 1,$$

Затем в матр. форме

$$\sum_f |\hat{S}_{fi}^\dagger|^2 = 1$$

$$\sum_{f \neq i} |\hat{S}_{fi}^\dagger|^2 = 1 - |\hat{S}_{ii}^\dagger|^2$$

$$\sigma_r = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [1 - |\hat{S}_{ll}^\dagger|^2]$$

интер.  
сечение  
реакции

вернемся к (\*)

$$\sigma_r = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [1 - |S_l|^2]$$

① Видим, что  $\sigma_r \neq 0$  только в том случае, если  $|S_l| < 1$

Если  $\sigma_r \neq 0$ ;  $|S_l| < 1$ , то и  $\sigma_e \neq 0$

Любой неупругий процесс всегда сопровождается упругим рассеянием

Но упругое рассеяние не всегда сопровождается неупругими процессами

② Если  $|S_l| = 1$  значит есть упругое рассеяние, а неупругие процессы отсутствуют

③ Если  $|S_l| = 0$ , то есть полная поглота падающих частиц, минимально

Есть  $G_0 + G_H = G_T$ , то (наиме сечение всех процессов)  
total

$$G_T = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \operatorname{Im} f_l(\theta)$$

{ Ф.ле Паконо - ...

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (1 - S_l) P_l(\cos \theta)$$

Минимое сечение асимптотическое рассеяние по нулевому углу

$$\operatorname{Im} f(0) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \operatorname{Im} f_l(0)$$

$$G_T = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(0)$$

~~Оптическая~~ теорема  
(Бора - Паконо - Кнорчека)

Эксперим. невозможно опред. сечение рассеяние по нулевому углу, т.к. мы не сможем различить частицу рассеянную по нулевому углу и частицу, идущую в первую очередь (перес)

Только по нулевому углу - оптическая точка



Определим сечение упругого рассеяние и сечение реакции медленных газов.

Если газ медл., то основной вклад дает  $l=0$ , т.к.  $S_l \approx 1$  для  $l > 0$  (78)

$$S_0 = e^{2i\delta_0}$$

$\delta_0$  - маленькое, т.к.  
 $\delta_0 \sim k$  а для малой  
 частицы  $k \rightarrow 0$

т.к.  $\delta_0$  - мало, то можно разложить в ряд

$$S_0 = e^{2i\delta_0} = 1 + 2i\delta_0 = 1 - 2ika$$

где  $a$  - длина  
 рассеяния

Если только упругий канал,  $\delta_0$  - действ.  
 $a$  - действ.

Если возможны неупругие процессы  $\delta_0$  - комплекс.  
 $a$  - комплекс. вел.

т.е.  $a = a_1 + i a_2$

$$\left. \begin{aligned} |S_0| \leq 1 \quad \text{т.к.} \quad \hat{S}^\dagger \hat{S} = 1 \end{aligned} \right\}$$

$$|1 - 2ika_1 + 2ka_2|^2 \leq 1$$

$$\sqrt{(1 + 2ka_2)^2 + 4k^2 a_1^2} \leq 1$$

$a_2 < 0$ , тогда матрица рассеяния будет унитар.

$$\sigma_e = 4\pi/a^2$$

$$\sigma_{tr} = \frac{\pi}{k^2} [1 - |S_0|^2] = \frac{\pi}{k^2} [1 - |1 - 2ika_1 + 2ka_2|^2]$$

$$= \frac{\pi}{k^2} [1 - 1 - 4ka_2] = \frac{4\pi}{k} |a_2| \Rightarrow \sigma_{tr} = \frac{4\pi}{k} |a_2|$$

Сечение реакции зависит от  $k$ , рав. энергии

$$\hbar k = p = mv$$

Закон  $\frac{1}{v}$

# Глава 3 ~~В~~ Движение в магнитном поле

## §17 Уравнение Шредингера в МД

$$H = \frac{1}{2m} \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\varphi \quad \vec{p} - \text{импульс или}$$

при переходе к квант. мех  $\vec{p} \rightarrow \hat{p}$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\varphi$$

В класс. физике нет спина частицы

Если у частицы есть спин  $\neq 0$  то есть магн. дипольный момент и будет взаимодейств. с МД

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\varphi - \hat{\mu} \vec{H} \quad \mu - \text{опер. магн. мом. частицы}$$

$\mu$  связан с опер. спином

$$\vec{\mu} = \mu \frac{\vec{S}}{S}$$

$S$  - составная опер. спина

Выберем ось квантования и проект. магн. мом. на ось квантования, то получим:

$$\mu_z = \mu \frac{S_z}{S}$$

$\mu$  - макс. знач. проекц. магн. мом. на ось квантов. (при  $S_z = S$ )

Магнитный мом. магнитона

магнетон Бора

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} = 0.579 \cdot 10^{-8} \frac{эВ}{Гс}$$

$$\mu_e = -\mu_B$$

переход к  $p$  и  $n$

$$S = 1/2$$

$$\boxed{\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p c}} \text{ — ядерный магнетон}$$

$$= 0,31 \cdot 10^{-11} \frac{\text{Дж}}{\text{Гс}}$$

оказывается, эксперим. дает  $\mu_p = 2,79 \mu_N$   
и  $\mu_n = -1,91 \mu_N$

$\{p \text{ и } n \text{ обладают аналогичным магн. мом}\}$

Опер. алгебра квантит с векторным  
потенц.  $\vec{A}$

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

$$+ e\varphi - \vec{\mu} \vec{H}$$

$$p = i\hbar \nabla \quad \vec{A} \vec{p} - \vec{p} \vec{A} = i\hbar \text{div} \vec{A}$$

Если  $\text{div} \vec{A} = 0$ , то  $\vec{A}$  и  $\vec{p}$  — квантит алгебры  
собой

$\vec{A} = \frac{1}{2} [\hat{x}, \hat{z}]$  — если возмущ.  $\vec{A}$  таким  
образом, то  $\text{div} \vec{A} = 0$ , и  $[\vec{p}, \vec{A}]$  — квантит

Затем можно упрощ. Шредингера для  $\psi$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left( \vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \psi + \mu_B \vec{\sigma} \vec{H} - e\varphi \psi + \dots$$

# §18 Движение заряженной частицы в однородном МП

21.11.2012

Определим уровни энергии в пост. однород. МП  
 Можно выбрать векторный потенциал

$$A_x = yH$$

$$A_y = A_z = 0$$

$$\vec{H} = \text{rot } \vec{A}$$

МП направлено вдоль оси z

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left[ \left( \hat{p}_x + \frac{eH}{c} y \right)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 \right] - \frac{M}{S} \hat{S}_z H$$

опер.  $[\hat{S}_z, \hat{H}] = 0$ , т.к.  $\hat{S}_z$  не содержит  $\vec{r}$  и  $\vec{p}$  кроме  $\hat{S}_z$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left[ \left( \hat{p}_x + \frac{eH}{c} y \right)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 \right] - \frac{M\hbar}{S} \left\{ \psi / \tilde{z} \right\}$$

Запишем уравн Шредингера

$$\frac{1}{2m} \left[ \left( \hat{p}_x + \frac{eH}{c} y \right)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 \right] \psi / \tilde{z} = E \psi / \tilde{z}$$

$\hat{H}$  не содержит явно координат  $x$  и  $z$ ,  
 т.к.  $[x, z] \neq 0$  то опер.  $[\hat{p}_x, \hat{H}] = 0$  и  $[\hat{p}_z, \hat{H}] = 0$ ,  
 т.е.  $x$  и  $z$  - составляющие общего интеграла движения  
 сохраним  $(\hat{p}_x, \hat{p}_z = \text{const})$  ищем по  $x$  и  $z$  решение в виде плоских волн

$$\psi / \tilde{z} = e^{i p_x x - i p_z z} \chi(y)$$

Все сводится к одномерной задаче

(8d)

$A_z = 0$  значит  $\hat{p}_z$  совпадает с скоростью движения частицы вдоль оси  $z$ .  
 т.е. скорость частицы вдоль оси  $z$  может иметь произвольное значение, движение вдоль  $mp$  не квантуется

$$\hat{p}_y^2 = \hbar^2 \frac{d^2}{dy^2}$$

$$X''(y) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ E + \frac{M\Omega\hbar}{S} - p_z^2 \cdot \frac{1}{2m} - \frac{m}{2} \omega_H^2 (y - y_0)^2 \right] X(y) = 0$$

$$X(y) = 0$$

$$\rightarrow E = \left( E + \frac{M\Omega\hbar}{S} - \frac{p_z^2}{2m} \right)$$

энергия

$$\omega_H^2 = \frac{|e|\hbar}{mc}$$

$$y_0 = -\frac{c p_x}{e\hbar}$$

циклотронная частота

$$X''(y) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ \epsilon - \frac{m}{2} \omega_H^2 (y - y_0)^2 \right] X(y) = 0$$

уравнение гармонического осциллятора

$$E_n = (n + 1/2) \hbar \omega_H$$

$$E_n = (n + 1/2) \hbar \omega_H - \frac{M\Omega\hbar}{S} + \frac{p_z^2}{2m}$$

напр.

возбуждения по  $p_z$  с кратностью  $\infty$ .

$$-\infty < p_x < +\infty$$

$$-\infty < p_z < +\infty$$

первый шаг дает дискр. уровни энергии, а второй шаг — непрерывный набор уровней энергии

переходим к электрону

Электрон

$$m_e = - \frac{e\hbar}{2mc}$$

$$-\frac{e\hbar}{2mc} \sigma H = -\hbar \omega_H \sigma$$

$$\left[ E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_H + \frac{p_z^2}{2m} \right]$$

спин  $\sigma$   
в МД

Для  $\sigma$  в МД, есть только вырождение,  
не связанное со своим  
симметрии

$$\left( n, \sigma = \frac{1}{2} \right)$$

$$\left( n+1, \sigma = -\frac{1}{2} \right)$$

$y_0$

$$x_0 = \frac{c p_y}{em} + x$$

$[\hat{x}_0, \hat{y}_0] \neq 0$ , не могут одновременно иметь  
определенные значения.

§19 Атом в магнитном поле

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}_a^2 + \frac{|e|\hbar}{c} \hat{A}_a(\vec{r}_a) + \frac{|e|\hbar}{mc} \vec{H} \cdot \vec{S} + \hat{V}_a(\vec{r}_a) = \frac{1}{2} [\vec{H}, \vec{r}_a]$$

$\frac{1}{2m} \hat{p}_a^2 + \hat{V}_a$  не зависит от  $\vec{H}$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{|e|\hbar}{2mc} \hat{p}_a [\vec{H}, \vec{r}_a] + \frac{e^2}{8mc^2} [\vec{H}, \vec{r}_a]^2 + \frac{|e|\hbar}{mc} \vec{H} \cdot \vec{S}$$

$$\hat{p}_a \hat{A}_a = \hat{A}_a \hat{p}_a$$

$$\frac{\partial}{\partial a} \hat{p}_a [\vec{H}, \vec{r}_a] = \frac{\partial}{\partial a} [\vec{H}, \vec{r}_a] \hat{p}_a = \vec{H} \frac{\partial}{\partial a} [\vec{r}_a \hat{p}_a] = \hbar \vec{H} \frac{\partial}{\partial a} \hat{L}_a = \hbar \vec{H} \hat{L}_a$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{|e|\hbar}{2mc} (\hat{L} + 2\hat{S}) + \frac{|e|^2}{8mc^2} [\vec{H}, \vec{r}_a]^2$$

$$\frac{|e|\hbar}{2mc} (\hat{L} + 2\hat{S}) \vec{H} = \frac{|e|\hbar}{2mc} (\hat{J} + \hat{S}) \vec{H} = -\vec{\mu}_{at} \vec{H}$$

$$\boxed{\vec{\mu}_{at} = -\mu_B (\hat{J} + \hat{S})}$$

опер. магн. момента атома

Магн. мом. атома не коммутирует с пол.  
мом. мом. ион. атома

# Расщепление уровней слабых МП

$$\mu_B H \ll \Delta E$$

## Эффект Зеемана

$J, L, S$   
Восстанавливаем теорию возмущения  
т.к. МП слабые, то берем первый мен, линей-  
ный по  $H$ , т.к. квадрат даст малую поправ-  
ку по величине

Ось  $Z$  - вдоль поле.  $\hat{H}(\hat{J} + \hat{S}) = \mu_B (\hat{J}_z + \hat{S}_z)$

$$\Delta E = \mu_B H (\langle \hat{J}_z \rangle + \langle \hat{S}_z \rangle)$$

энергия расщепл атомов в МП в первом  
приближении

$\langle \hat{J}_z \rangle$  - проекция полного мом. на ось  $Z$

$$\langle \hat{J}_z \rangle = M_J$$

$\langle \hat{S}_z \rangle$  опред. так, чтоб выполнял  $1/2 \hat{J}_+ \hat{J}_-$

$$\langle \hat{S} \rangle \rightarrow c \langle \hat{J} \rangle$$

$$\langle \hat{S}_z \rangle \rightarrow c \langle \hat{J}_z \rangle = c M_J$$

$$\langle \hat{S} \hat{J} \rangle = c \langle \hat{J}^2 \rangle = c J(J+1)$$

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$$

$$\hat{L} = \hat{J} - \hat{S}$$

$$\hat{L}^2 = \hat{J}^2 + \hat{S}^2 - 2\hat{J}\hat{S}$$

$$\langle \hat{S}\hat{J} \rangle = \frac{1}{2} \langle \hat{J}^2 + \hat{S}^2 - \hat{L}^2 \rangle = \frac{1}{2} [J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)]$$

$$C = \frac{\langle \hat{S}\hat{J} \rangle}{\langle \hat{J}^2 \rangle} = \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

$$\langle S_z \rangle = \frac{M_J [J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)]}{2J(J+1)}$$

$$\Delta E = \mu_B H (\langle \hat{J}_z \rangle + \langle \hat{S}_z \rangle)$$

$$\boxed{\Delta E = \mu_B H M_J g} ; \quad g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

Физ. Ч. 8, § 16

$g$  — коэффициент  
 параллельной  
 проекции  
 магнитного момента  
 $g$  — фактор

Ландэ

Если  $S=0$ , то  $\boxed{g=1}$  — нормальный эффект Зеемана

Если  $\boxed{g \neq 1}$ , то аномальный эффект Зеемана

Если  $L=0$ ,  $J=S$ , тогда  $\underline{g=2}$

$$\Delta E = \mu_B g M_J H$$

$$H = H_0 + \mu_B (\hat{J} + \hat{S}) H + \frac{e^2}{8\pi m c^2} \frac{1}{2} [H \vec{r}_a]^2$$

28.11  
2022

(87)

$$4D_{1/2} \quad J = 1/2 \quad L = 2 \quad S = 3/2$$

$$g = 0$$

Если атом нах. в сост-ии с равным нулю  
спин. и орбит. мом. ( $L=0, S=0$ ) то  
все поправки во всех порядках по  
теории возмущ.  $\Rightarrow 0$ .

$$S=0 \quad L=0$$

$$\Delta E = \frac{e^2}{8\pi mc^2} \sum_a \langle [\vec{N} \vec{r}_a]^2 \rangle$$

$$\theta = \mu^1 r_a$$

$$[\vec{N}, \vec{r}_a]^2 = \mu^2 r_a^2 \sin^2 \theta$$

$$\langle \sin^2 \theta \rangle = \frac{\int_0^\pi d\theta \sin \theta \sin^2 \theta}{\int_0^\pi d\theta \sin \theta} = \frac{2}{3}$$

$$\Delta E = \frac{e^2 \mu^2}{8\pi mc^2} \sum_a \langle r_a^2 \rangle$$

Среднее значение гамильтониана по параметру  
М. Хельман - Фейнман  $(\Psi | \hat{H} - E)$

$$(\hat{H} - E_n) \Psi_n = 0$$

$$\hat{H}(\lambda) E_n(\lambda) \Psi_n(\lambda)$$

$$(\hat{H} - E_n) \frac{\partial \Psi_n}{\partial \lambda} = \left( \frac{\partial E_n}{\partial \lambda} - \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \right) \Psi_n$$

$$(88) \int \Psi_n^* (\hat{H} - E_n) \frac{\partial \Psi_n}{\partial \lambda} = \int \Psi_n^* \left( \frac{\partial E_n}{\partial \lambda} - \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \right) \Psi_n d\tau$$



# Глава 4 Выхватившая молекула

## §20 Электронное термод Выхватившая молекула

В главе возникает аксиальная симметрия  
 Все будет аксиально-симметрично  
 Орбит. момент сохр только в  $U(1)$  поле

В  $A-C$  поле есть сохр проекции орбит.  
 мом. на ось симметрии

$\Lambda$  - проекция орбит. мом. на ось

Для атома, орбит. мом  $L = 0 \pm 2 \dots$   
 $S \quad P \quad D \dots$

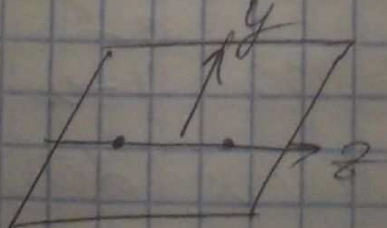
Атом молекула есть  $\Lambda = 0 \pm 2 \dots$   
 $\Sigma \quad \Pi \quad \Delta \dots$

В первом приближении можно рассм. молекулу  
 с фикс. расст-ем между атомами

$S \neq 0$   $2S+1$  - мультиплетность термина  $^3\Pi$   
 (слева вверх)

У молекулы есть ось симметрии

Сделаем отраж. по ~~оси симметрии~~  $xy$ -пл-ти



$$\begin{aligned} x &\rightarrow -x \\ y &\rightarrow +y \\ z &\rightarrow z \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} p_x &\rightarrow -p_x \\ p_y &\rightarrow p_y \\ p_z &\rightarrow p_z \end{aligned}$$

$$\hbar \hat{L}_z = x \hat{p}_y - y \hat{p}_x \rightarrow -\hbar L_z$$

$$L \rightarrow -L$$

Все сост-ия, для кот.  $L \neq 0$ , обнаружено  
воронье

2-х не воронье

$$\psi \rightarrow c\psi$$

$$c^2 = 1$$

$$\psi \rightarrow c^2 \psi$$

$$c = \pm 1$$

"+" не мен  
"-" не противоречит

Если мажорно сост. из 2х били, атомов  
( $H_2$ ,  $N_2$  и т.д.)

Кроме аксиальной симметрии, возникает  
еще и центр-симметрия



Гамильтониан будет инвариантен от осей.  
 $E$ , при перм. сост-ий ядер

gerade - четный

ungerade - нечетный

Сост-ие с парной четностью

$${}^3\Pi_g$$

с odd-ой четностью

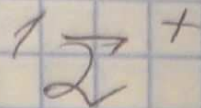
$${}^3\Pi_u$$

92 Удовлетворяя условию стационарных жидкостей

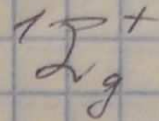
моментов атом. квант симметричен

$$S_z = 0$$

Основное сост.



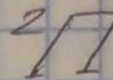
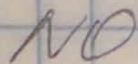
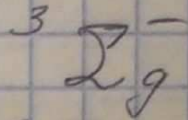
и у одинак атомов



Умножение:



осн. сост-ие



# §21 Валентность

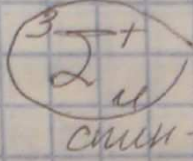
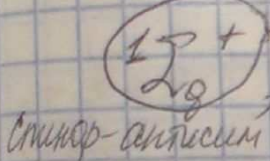
валентность - характеристика способности атомов соединяться друг с другом.

$H_2$

Атом водорода в осн. сост.  $^2S$

$$S = 1/2$$

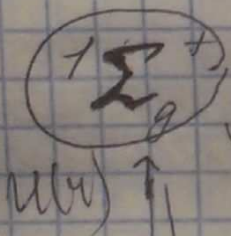
коорд. часть - симметр



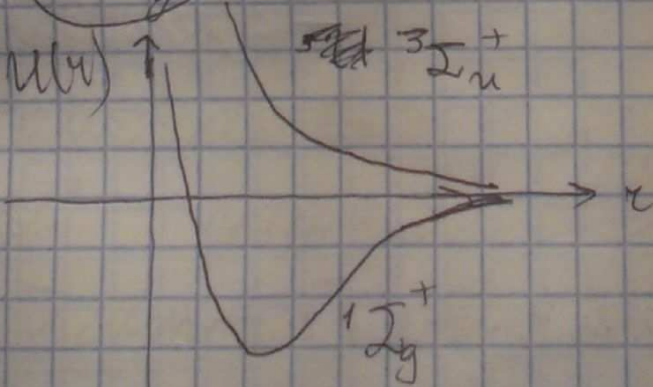
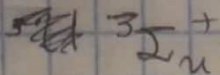
коорд. часть антисим

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi(\vec{r}_1, -\vec{r}_2)$$

протоны - это фермионы, а по принципу Паули электроны не могут находиться в осн. сост. их

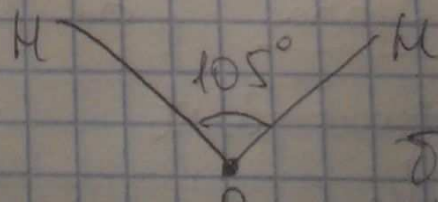
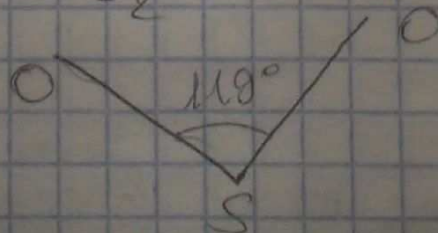


- основное сост-ие молекулы  $H_2$



$H_2O$

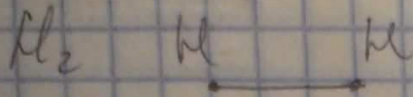
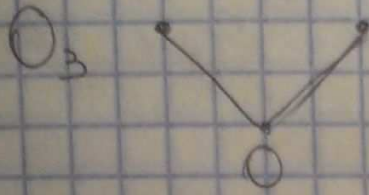
$SO_2$



дуги

$CO_2$





Гайдер и Лондер

Способность атома соединяться с другими атомами в их степенях

Валентность водорода — удвоенный степен атома

Максимальная валентность — удвоенный степен атома

$C_6H_6$  — бензол



— — — — — полуторная валентность

5.12.  
2012

I группа

Li, Na, K, Rb, Cs, Fr

Щелочные металлы

$$S = 1/2$$

Валентность = 1

(96) Вступают в соедин. только в основном состоянии

II Группа Be, Mg, Ca, Sr, Ba, Ra

Щелочно-земельных Мет

$$S = 0$$

Возникают в соединении, т.к. очень близко к основному состоянию находится 1ое возбужденное состояние.

$$1s^2 2s^2$$

→  $sp$  (околовозбуд.)

Симметричный спин - 1

Валентность = 2

III Группа

B, Al - трехвалентные, ост - и  $\frac{1}{2}$  и 3

$TlCl$ ,  $TlCl_3$

$$s^2 p$$

Спин  $S = \frac{1}{2}$

Валентность  $\leq \frac{1}{2}$  3

$$sp^2$$

спин =  $\frac{3}{2}$

(каждое около возбужд. состояние)

IV Группа

C, ~~Si~~ Si, Ge, Sn

$$s^2 p^2$$

$$S = 1$$

Валентность = 2

$$sp^3$$

$$S = 2$$

$$= 4$$

(около возбужд.)

Первые 2 эл. C, Si проявл. валентность 4.  
Одно исключение = CO (угарный газ)

$\text{CO}_2, \text{SiO}_2$  и т.д.

с ↑ атомного номера возрастает склонность к низшей валентности (г.е. 2)

V Группа N, P, As, Bi

$s^2 p^3$   $S = 3/2$  Валентность = 3

(лишь в возбужденном)  $s p^3 s'$   $S = 5/2$  = 5  
 $\text{NH}_3, \text{HNO}_3$

VI Группа O, S, Se

$s^2 p^4$   $S = 1$  Валентность = 2

(лишь в возбужденном)

$s^2 p^3 s' s'$   $S = 2$  Валентность = 4

$s p^3 s' p'$   $S = 3$  = 6

{ Кислород всегда проявляет только самую низшую валентность = 2

$\text{H}_2\text{S}, \text{SO}_2, \text{SO}_3$

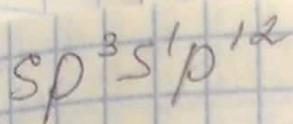
VII Группа

Галогены F, Cl, Br, I, At

$s^2 p^5$   $S = 1/2$  Валентность = 1

(лишь в возбужденном)  $s^2 p^4 s'$   $S = 3/2$  = 3

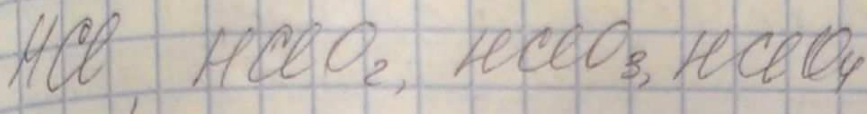
$s^2 p^3 s' p'$   $S = 5/2$  = 5



$$S = 7/2$$

$$\text{Валентность} = 7$$

Всего валентных электронов



VIII Группа Xe, Kr, Ar, Ne

Инертные газы (благородные)  
наименее химически активны  
Барклет 1962 г. открыл соедин. XePtF<sub>6</sub>

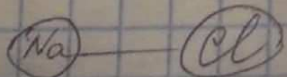
Kr, Xe может образов. соедин. с F, O, ...

Тяжелые инертные газы могут образов. соедин.

У посл. элементов есть перех. в блуждающие электроны (по энергии) d и f-оболочки

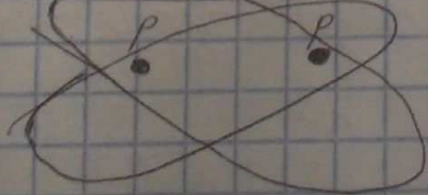
① Молекулы могут образ. гетерополярные молекулы или ионную связь  
Наиболее известное соедин. — NaCl

$Na^+Cl^-$  2 электр. имеют. частицы и у них разнонаправленные моменты



(большие дипольные моменты)

② Гомополярная или ковалентная связь



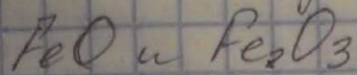
Возможно образование и связи 2 атома вместе

(маленькие дипольные моменты)

Майкуры переходных групп

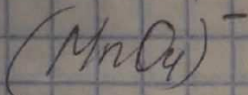
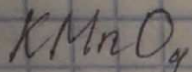
Возникают соединения, которые майкуры не могут  
образ. Связь не полностью ковалентная. ( $S \neq 0$ )  
Валентности могут меняться не на 1, а на 2.

Значительная группа железа

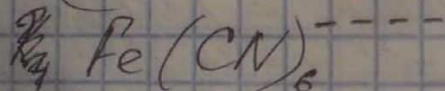


может образ. комплексы (атомы распр. в основном  
широко друг к другу)

~~Все~~ Комплексообразователи — соединения, которые способны  
комплекс

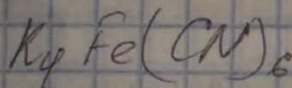


— окислительный

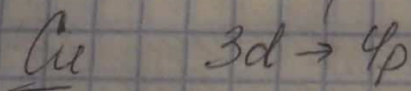


— четырехвалентный

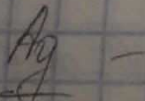
комплекс



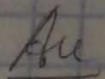
Cu, Ag, Au (медь, серебро, золото)



— ведет себя как элемент группы  
железа



ведет себя, как элемент группы  
палладия

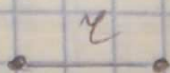


— как элемент группы платины

## § 2.2 Колебательное и вращательное строение симметричных термов двухатомных молекул

Симметричные термы — они равны 0

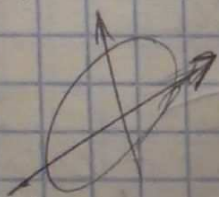
Рассм. двухат. молекулы



Атомы могут колебаться и вращаться

Двухат. молекула не может вращ. вокруг оси симметрии, т.к. все состояния будут вырожденными.

Поэтому атомы будут вращаться вокруг оси, ⊥ оси симметрии



$U(r)$  — энергия при фиксир. расст. между молекулами двух атомов.

Если есть двухатомная молекула, и полный электр. момент будет:

$$\vec{L}$$

Если молекула вращ., то имеем. момент вращения.

$\vec{K}$  — полный момент молекулы, кот. сост. из электр. момента и момента вращ.

$(\vec{K} - \vec{L})$  — момент вращения

$[B(r)(\vec{K} - \vec{L})^2]$  — энергия вращения

Если брать простейшую модель молекулы, то

$$B(r) = \frac{\hbar^2}{2\mu r^2}$$

$\mu$  - приведенная масса

$$(\vec{K} - \vec{L})^2$$

Важно усреднить  $B(r)$  по электр. соед. вол. получим  $\mu$  центробежную энергию завис. от  $r$

$$U_K(r) = U(r) + B(r) \langle (\vec{K} - \vec{L})^2 \rangle$$

Введем усредн. по соед. в кот. полная мом. имеет опред. значение

$$\langle \vec{K}^2 \rangle = K(K+1)$$

$K$  - целое число

$$\langle \vec{L}^2 \rangle = \Lambda$$

$\Lambda$  - квантовое число

$$U_K(r) = U(r) + B(r) K(K+1) - 2B(r) \langle \vec{K} \vec{L} \rangle + B(r) \langle \vec{L}^2 \rangle$$

$\xrightarrow{\text{зависит только от } \Lambda}$

$\xrightarrow{\text{зависит только от } \Lambda}$

$\xrightarrow{\text{зависит только от } \Lambda}$

$$\langle \vec{K} \vec{L} \rangle = \langle K_x L_x \rangle + \langle K_y L_y \rangle + \langle K_z L_z \rangle \quad \textcircled{2}$$

Каждый опер. должен усредн. независимо

$$\textcircled{2} \langle K_x \rangle \langle L_x \rangle + \langle K_y \rangle \langle L_y \rangle + \langle K_z \rangle \langle L_z \rangle =$$

$\underbrace{\quad}_0 \quad \underbrace{\quad}_0 \quad \underbrace{\quad}_\Lambda$

$$\Rightarrow \langle \vec{K} \vec{L} \rangle = \langle K_z \rangle \Lambda$$

т.к. вращ. может происх. только 1 осью симм. то вращ. должен быть 1 осью симм.

$\vec{n} = 1$  - перпендикулярной единичной вект.

$$\hat{K}(\hat{K}-1)\hbar = 0$$

$$\hat{K}\hbar = \hat{L}\hbar$$

$$\langle \hat{K} \rangle = \langle \hat{L} \rangle$$

$$\langle \hat{K}_z \rangle = \langle \hat{L}_z \rangle = \Lambda$$

Тогда, еще термин будет выражением:

$$[U_k(r) = U(r) + B(r/K(K+1))]$$

$\langle K_z \rangle = \Lambda \Rightarrow$  квантовое число может быть меньше  $\Lambda$

$$K \geq \Lambda$$

$U_k(r)$  - подставить в уравнение Шредингера  
реш. с этой термией. Если  
решим, получим спектр уровней.  
Можно этот спектр проинтерпретировать  
1, 2, 3, 4, ... некоторым квантовым числом  
 $V$   $V = 1, 2, 3, \dots$

Все величины, кот. входят в потенциал энергии  $(U(r))$   
разомкнуты в  $r=0$

$$\vec{r} = r - r_e$$

$r_e$  - значение при  
кот.  $U(r)$  имеет  
min

$$U(r) = U_e + \frac{\mu \omega_e^2}{2} \vec{r}^2$$

$U_e = U(r_e)$   
 $\omega_e$  - частота колебаний  
ядер  
 $B = B(r_e)$

$$B(r) = B_e + m$$

Все разном. найдем

$$[U_k(r) = U_e + B_e K(K+1) + \frac{\mu \omega_e^2}{2} \vec{r}^2] \text{ Энергия ядра молекулы}$$

Это термиде осциллятора и ядра сводится к задаче о термиде осциллятора

$$B_e = \frac{\hbar^2}{2\mu r_e^2} = \frac{\hbar^2}{2I_e} \quad I_e = \mu r_e^2$$

$I_e$  — (вероятно) модель молекулы

$$E = U_e + B_e K(K+1) + \hbar \omega_e \left( v + \frac{1}{2} \right)$$

Термиде состоит из трех величин:

- термиде электронов  $E_{el} = U_e$
- вращательная термиде  $E_r = B(r) K(K+1)$
- колебательная термиде  $E_v = \hbar \omega_e \left( v + \frac{1}{2} \right)$

$$E = E_{el} + E_r + E_v$$

Надо сказать какой вклад каждой термиде

$$\frac{m_e}{m_e} \gg 1 \quad \frac{m_e}{m_e} \ll 1$$

$E_{el}$  не зависит от масс ядер

$E_r$  зависит  $B_e \sim \frac{1}{\mu}$

$E_v$  зависит  $\omega_e \sim \frac{1}{\sqrt{\mu}}$

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

Таким образом:

$$\Delta E_{el} \gg \Delta E_r \gg \Delta E_v$$

ев урвни

врану.  
ч

9.15  
калеб.

# §23 Мультиметное Термор

12.12.2012

Мультиметное - Спин мажора отложен от нуля

Есть мо. в нулевом приближении отбро-  
сим спин. то уровень будет вращающ  
с  $2S+1$ .

когда нач. упирается в уровень орбит.  
то в таком случае говорят, как  
о вращающемся спин-осо.

Основной вклад в спин-осо - спин-орбит.  
вращающееся

А) Спин, когда вращающееся спин-осо  
вращается по сравнению с характером  
расщепления уровня вращающегося

А) Е

В случае А, у нас есть спин-осо  
вращающееся. проскучив спин. по своему  
мажору. -  $\Sigma$

$\Sigma$  может принимать значения  $S, S-1, \dots, -S$

$\Sigma > 0$  , когда напр. проскучив спин. по своему  
соборит с напр. орбит. машины

$\Omega = L + \Sigma$  - проскучив машины на  
ось симметрии машины (10)

$\Sigma$  может принимать значения  $L+2, L+1, L, L-1, L-2$

Электр. мом. с  $\Lambda$  расщепляется на  $2S+1$   
 $\Omega$  ур. вправо внизу у термо

$$^2P_{1/2} = \Omega$$

Учет движения ядер приводит к возникновению  
 вращательной структуры.

В случае  $\Lambda$  расщ. между вращ. уровнями  
 по арг. с вращ. спин-ос. а это означает, что  
 квантового числа  $K$  - не существует,  
 но есть полный момент молекулы  $J$

$J$  принимает знач.  $\Omega, \Omega+1$

Усредним по электронном термале  
 $\hat{L} \hat{S}$

В рез-те усреднения получим  $U(r)$ -энергия  
 невозбужд. электр. терм.

а также спин-заст  $A(r) \cdot \hat{L}$

зав.  $\Lambda$  вкл. в  $U(r)$

Перейти к проекции мом. мом.  $\Omega \Rightarrow \frac{+A(r)}{-A(r)}$

$$U(r) - A(r) \hat{L} + A(r) \Lambda - A(r) \Lambda \Rightarrow U(r) + A(r) \Omega$$

Вывайте докажем, что  $A(r) = 0$ , для  $\hat{L}$   
 изменим знак времени в (\*)

$t \rightarrow -t$ , тогда все моменты и проекции  
 моменты меняют знак. т.е.

это означает, что  
при нулях,  
расши  $A(r)$ .

$\Sigma$  и  $L$  - меньше знак

где  $\Sigma$  терм ( $A=0$ )  
 $A(r)$  - меньше знак,  
а терм должно быть, а  
значит  $A(r)=0$ .

Часть вращов. стич-ось

$$B(r)/(\vec{J}-\vec{L}-\vec{S})^2$$

останется только мал.  
вращ.

Энергия всегда содержит малые вращ.  
в квадрате и всегда умнож на  
 $B(r)$  - оператор центрального момента

Надо усреднить  $A$  по терм терму и  
сложить с энергией  $U(r)$ , тогда мож  
написать энергию расщепления  
молекулярной терм  
через по неформ. вектор. сост. молекулы

$$\begin{aligned} \langle J(r) \rangle &= \langle U(r) \rangle + A(r) \Sigma + B(r) \langle (\vec{J}-\vec{L}-\vec{S})^2 \rangle = \\ &= U(r) + A(r) \Sigma + B(r) [ \langle \vec{J}^2 \rangle - 2 \langle \vec{J}(\vec{L}+\vec{S}) \rangle + \\ &+ \langle \vec{L}^2 \rangle + 2 \langle \vec{L}\vec{S} \rangle + \langle \vec{S}^2 \rangle ] \end{aligned}$$

$$\langle \vec{J}^2 \rangle = J(J+1)$$

$$\langle \vec{S}^2 \rangle = S(S+1)$$

$\langle \vec{L}^2 \rangle$  не зависит от стина, т.е.  $B(r) \langle \vec{L}^2 \rangle$  мож  
включить в  $U(r)$ , тк. завис. только от  $L$

$$\vec{J}(\vec{L}+\vec{S}) \quad (\vec{J}-\vec{L}-\vec{S})\vec{n}=0$$

$$\hat{J} \vec{n} = (\hat{L} + \hat{S}) n$$

переходим к усреднению

$$\langle \hat{L} \vec{n} \rangle = \Lambda$$

$$\langle \hat{S} \vec{n} \rangle = \Sigma$$

$$\langle (\hat{L} + \hat{S}) \vec{n} \rangle = \Sigma$$

$$\langle \hat{J} \vec{n} \rangle = \Sigma$$

$$\langle \hat{J} / (\hat{L} + \hat{S}) \rangle = \langle \hat{J} \rangle \langle \hat{L} + \hat{S} \rangle = \Sigma^2$$

В квант. в предс. где диаг. опер.  $\hat{L}_z, \hat{L}_x, \hat{L}_y$  не им. диаг. состояний

$$\langle \hat{L} \hat{S} \rangle = \langle \hat{L} \rangle \langle \hat{S} \rangle = \Lambda \Sigma \rightarrow \Lambda \Sigma$$

$$U_J(r) = U(r) + A(r) \Sigma + B(r) [J(J+1) - 2 \Sigma^2]$$

Равняем  $U(r), A(r)$  велич.  $m/r^n$

$$\xi = r - r_e$$

$$U(r) = U_e + \frac{1}{2} \mu \omega_e^2 \xi^2$$

$$U_e \equiv U(r_e)$$

$$A(r) = A_e \equiv A(r_e) \quad B(r) = B_e \equiv B(r_e)$$

$$U_J(r) = U_e + A_e \Sigma + B_e [J(J+1) - 2 \Sigma^2] + \frac{1}{2} \mu \omega_e^2 \xi^2$$

Вместо гамильтоновского оператора о гармонич. и оне энергии расписать в случае (А) попер.

$$E = U_e + A_e \Sigma + B_e [J(J+1) - 2 \Sigma^2] + \hbar \omega_e (v + \frac{1}{2})$$

140 в этом случае нет к. т.к. вращ. маломомента по теории возмущ.

В) Иерние стии ось мало по слав  
немно с расстанием между бра  
шат уравнели

И. К - будет существовать.

$$U_k(r) = U(r) + V(r) K(K+1)$$

$$\vec{J} = \vec{K} + \vec{S}$$

- используем стии.

Число J при данном K может  
принимать знач.  $K-S \leq J \leq K+S$

Квантовых чисел L, S не сущ.

Используем. добавку свей с брашмо стии ось

Должна усреднить по экстр. терму экстр.  
состоянию и

В результате усредн по экстр. терму получим

$$A(r) \vec{S} \vec{K}$$

Надо усреднить  $\vec{S} \vec{n}$   
состояв. копр. определ. вектором  $\vec{K}$ , в присутствии  
под знаком усреднения,  $\vec{n} \rightarrow c \vec{K}$ , где стии  
 $c = \text{const} \leq ?$

$$(\vec{K} - \vec{L}) \vec{n} = 0$$

$$\langle \vec{n} \vec{K} \rangle = c \langle \vec{n} \vec{L} \rangle = \Delta$$

$$\langle \vec{n} \vec{K} \rangle = c \langle \vec{K}^2 \rangle = c K(K+1)$$

$$c = \frac{\Delta}{K(K+1)}$$

$$\langle \vec{n} \vec{S} \rangle = \langle c \vec{K} \vec{S} \rangle$$

$$\vec{J}^2 = \vec{K}^2 + \vec{S}^2 + 2 \vec{K} \vec{S}$$

$$\langle \vec{K} \vec{S} \rangle = \frac{1}{2} [J(J+1) - K(K+1) - S(S+1)]$$

Новая 5  
24

141

таким образом, среднее знач. энергии браунно  
векторов спин-ось

$$U_{\text{спин+ось}}(\chi) = A(\chi) \frac{\Lambda}{2K(K+1)} [J(J+1) - K(K+1) - S(S+1)] =$$

$$= A(\chi) \frac{\Lambda}{2K(K+1)} (J-S)(J+S+1) - \frac{1}{2} A(\chi) \Lambda$$

отправл. в  $U(\chi)$

$$U_K(\chi) = U(\chi) + B(\chi) K(K+1) + \frac{A(\chi) \Lambda}{2K(K+1)} (J-S)(J+S+1)$$

$$U(\chi) \Rightarrow U_e = U(\chi_e) + \mu \omega_e \xi^2 \quad \xi = 2 - \chi_e$$

$$U(\chi) = U_e + \frac{1}{2} \mu \omega_e \xi^2 \quad A(\chi) = A_e \quad B(\chi) = B_e$$

$$U = U_e + B_e K(K+1) + \frac{A_e \Lambda}{K(K+1)} (J-S)(J+S+1) + \frac{1}{2} \mu \omega_e \xi^2$$

$$E = U_e + B_e K(K+1) + \frac{A_e \Lambda}{K(K+1)} (J-S)(J+S+1) + h \omega_e / 4$$

С Если браунно. сплет. мал-ось ~~мало~~, но  
сравнимо с браунно. спин сплет.  
Если есть в молекуле — f-электроны.  
их браунно. ослаблено.

А Встреч. где высокочастотные браунно. уровни  
с большим J, кот. почти у легких  
молекул  $H_2$ ,  $He_2$  у них маленькие  
моменты инерции и большие браун.  
энергии

1/2

§ 25. Силое ВандерВаальсо

19.12  
2012

СВ. — сила, кот. действует между  
атомными ядрами на  
расстояниях

Атомно-ядерно-нейтр, как могут взаимодействовать  
кванты ядеров могут быть возникать  
микроэлементарные моменты.

Важно не слово, можно по-  
теоретически возмущен.

Первое поправо-договорное

В соот опред гетт - 0  
портмону для мам не может  
быть поправку энергии в том  
версии. Второе поправка  $\neq 0$

Должно  
много  
лет

опред. Тучо переселку  
мощности найти мост

Р-  $\text{H}^+$  между атомами  
полюс отриц. в-се между  
ООН. молекулами =

$$\frac{u/R/2}{R^3} \frac{d_1 d_2}{d_1 d_2} \frac{3(d_1^{(1)})(d_2^{(2)})}{R^3}$$

$d_1, d_2$  — диаметры  
 $N$  — радиус верт

$$n = \frac{R}{R}$$

$$U(r) = \frac{d^{(1)} d^{(2)} - 3 d_2^{(1)} d_2^{(2)}}{R^3}$$

$\Delta E =$  поправка энергии

$\Delta E(R)$  - матриц элемент

$$\Delta E(R) = \sum_{i,j \neq 0} \frac{|\langle \psi_i^{(1)} \psi_j^{(2)} | U(R) | \psi_0^{(1)} \psi_0^{(2)} \rangle|}{E_0^{(1)} + E_0^{(2)} - E_i^{(1)} - E_j^{(2)}}$$

б/ф  $\psi_0^{(1)}$   $\psi_0^{(2)}$  осн. сост  $\psi_i^{(1)}$  и  $\psi_j^{(2)}$

возб. сост. атомов

(8.49)  
7.50  
стр 300

подст  $U(R)$  в таком виде

каким образом зависит поправка энергии от расстояния между атомами  $(R)$

$$|\Delta E(R)| = -\frac{C}{R^6}$$

поправка всегда  
возникает всегда  
отриц.

$$C > 0$$

поправка из матр. элем.

Не учитывать поправки к энергии и силе В-В

(\*) и (\*)

$$|F(R)| = -\frac{6C}{R^7}$$

Если в  $S$ -сост. пока только один атом то для энергии взаимод.

(114)

атомов  $\Delta E(R)$  получ. поправку  
к терм.

Если дип. мом  $\neq 0$ , а когда он не  
равен нулю, то в том случае, когда  
дип. мом от квадр. мом.  
не может быть  $= 0$

$$L \neq 0, J \neq 0$$

средние значения  $\langle \mu \rangle = 0$ , а квадрат  
не  $\langle \mu^2 \rangle = 0$

$$\Delta E(R) = \frac{L}{R^5}$$

причем  $C$  может быть  $a_1 + a_2 + \dots$

но пока в разн. сост., возник эффект  
возвращения

Если первая поправка не обрац.  
в нуль, то  $\Delta E(R) = \frac{C}{R^3}$

В реале, когда расем газ от атомов.  
Согласно расетам вращ. атомов усредн.  
атомного м.м. Вращ. усредн.  
все м.м. нет вращ. усредн. (15)

остаются квадраты квадратного  
момента и остаются селог  
В-Д-В.

116

§26 Уравнение Швингера-Вайнберга

Уравнение Швингера

$$(E - H_0) \psi = U(r) \psi(r)$$

(стр. 357)

В задаче рассеяния данног  
вол это уравнение гранич  
при  $R \rightarrow \infty$  В/Ф  $\psi(r)$  должно  
иметь уравнение плоской и  
сфер-волн. Волны коэф.  
от коэф. амплитуды  $\mu$

$$\psi(r) = e^{ikr} + f(k, k') \frac{\exp(ikr)}{r}$$

$k, k'$  - вект налет и рассеян волн.

В/Ф будем писать с гранич.

$\psi^{(+)}(r)$  - сфер-волн в асимпт В/Ф.

$$\psi^{(+)}(r) = \exp(ikr) + \frac{1}{E - H_0 + i0} U(r) \psi^{(+)}(r)$$

$$\exp(ikr) (E - H_0) \exp(ikr) = 0$$

получить попут.

$$\delta(r - r') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q \exp[iq(r - r')]$$

$$U(r) \psi^{(+)}(r) = \delta(r - r') U(r') \psi^{(+)}(r')$$

(стр. 357)

т.к.  $\exp(iqr)$  - соответ. free oper  
 сумма  $\hat{H}_0$  с соответ.  $\hat{H}_{pert}$ .

$$E' = \hbar^2 q^2 / 2m$$

сп.  
359

$$= e^{iqr} - \int d^3z V(z) \psi^{(+)}(z) \frac{1}{(2\pi)^3} \cdot$$

$$\cdot \int d^3z' \frac{e^{i\mathbf{q}(\mathbf{z}-\mathbf{z}')}}{E-E'+i0}$$

Free Green  $G^{(+)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$

~~свободная~~

Free Summation - Умножение

$$\psi^{(+)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3z' \frac{\exp(i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{z}'))}{|\mathbf{r}-\mathbf{z}'|} \cdot$$

$$\cdot U(\mathbf{z}') \psi^{(+)}(\mathbf{z}')$$

$$\psi^{(+)}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{\exp(i\mathbf{q}\mathbf{r})}{r} \cdot$$

$$\cdot \int d^3z' \exp(-i\mathbf{q}'\mathbf{z}') U(\mathbf{z}') \psi^{(+)}(\mathbf{z}')$$

сп. 361  
 (118)

$$\psi^{(+)}(\mathbf{r}) = \hat{G}_0^{(+)} U(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) =$$

$$= \int d^3r_1 \hat{G}_0^{(+)}(r-r_1) \psi(r_1) \psi(r) \exp(i\mathbf{k}r_1)$$

$$\psi^{(2)}(r) = \hat{G}_0^{(+)} \psi(r) \hat{G}_0^{(+)} \psi(r) \exp(i\mathbf{k}r) =$$

$$= \iint d^3r_1 d^3r_2 \hat{G}_0^{(+)}(r-r_2) \psi(r_2) \hat{G}_0^{(+)}(r_2-r_1) \psi(r_1) \exp(i\mathbf{k}r_1)$$

~~$$\int_B \frac{1}{k k'} = \frac{m^2}{2\pi \hbar^2} \iint d^3r_1 d^3r_2 d^3$$~~

## **Глава 1. Атом. Ст 3**

1. Атомные уровни энергии. 3
2. Состояние электронов в атоме. 5
3. Водородоподобные уровни энергии. 9
4. Самосогласованное поле. 10
5. Рентгеновские термы. 15
6. Статистический метод Томаса-Ферми. 17
7. Тонкая структура атомных уровней. 22
8. Периодическая система элементов Д.И.Менделеева. 25
9. Мультипольные моменты. 31
10. Атом в электрическом поле. 35

## **Глава 2. Упругое и неупругое рассеяние. Ст 38**

11. Общая теория рассеяния. 38
12. Формула Борна. 45
13. Рассеяние медленных частиц. 51
14. Рассеяние заряженных частиц кулоновским полем. 56
15. Столкновения тождественных частиц. 63
16. Упругое рассеяние при наличии неупругих процессов. 69

## **Глава 3. Движение в магнитном поле. Ст 75**

17. Уравнение Шредингера в магнитном поле. 75
18. Движение в однородном магнитном поле. 77
19. Атом в магнитном поле. 80

## **Глава 4. Двухатомная молекула. Ст 85**

20. Электронные термы двухатомной молекулы. 85
21. Валентность. 88
22. Колебательная и вращательная структуры синглетных термов двухатомной молекулы. 94
23. Мультиплетные термы: а) взаимодействие спин-ось велико по сравнению с расстоянием между вращательными уровнями. 99
24. Мультиплетные термы: б) взаимодействие спин-ось мало по сравнению с расстоянием между вращательными уровнями. 103
25. Силы Ван дер Ваальса. 105
- 26\*. Уравнение Липпмана- Швингера.