5.09.
2012г

Глава -1- Атом

§ 1 Атомные уровни энергии

- Мы занимаемся нерелят. кв. мех-кой → состоян. должны опис-ся ур-ем Шредингера.
- У e^- орбит нет. Мы можем знать только вероятность движ. e^- в атоме.

В кв. мех-ке можно напис. ур-я для $3^{х}$, $4^{х}$ тел - ур-я Фадеева - решать их сложно, т.к большая система ур-й. Будем расм. простые

- атом в хорошем приближ. можно считать сферически-симметричным. В таких атомах эл. поле явл. центрально-сим. (сохр. полный орбит. мом. L и четность состоян.

Атом можно хар-ть полным мом. импульса L, полным спином S

по их проекциям

Кратность вырожд. уровней с опред L и S : (2L+1)(2S+1)

Должен сохр. полный мом.: $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$

Учет полного мом. приводит к расщеплению на ряд подуровней - мультиплеты, с разн. знач. J:

$|L-S| \leq J \leq L+S$

$L > S \rightarrow 2S+1$

$L < S \rightarrow 2L+1$

В мультиплете каждый уровень вырожден 2J+1 раз по проекциям полного момента импульса атома.

Атомные уровни эн. - спектральные термы

L =	0	1	2	3	4	5	...	...	...
	S	P	D	F	G	H			

мультиплетность терма

$^{2S+1}L_J$ – терм атома

Н-р: $^2P_{3/2}$ $S = 1/2$; $L = 1$; $J = 3/2$

$^4F_{9/2}$ $S = 3/2$; $L = 3$; $J = 9/2$

Терм- атомный уровень энергии

2S+1 = 1 - синглет
2S+1 = 2 - дублет
2S+1 = 3 - триплет

§2 Состояние электронов в атомах

- Пр. Паули запрещает 2м фермионам нах-ся в одном и том же состоянии. Поэтому каждый e^- нах-ся на своем энергетич. уровне.

- e^- в атоме движутся подобно свободным частицам, т.к. их столкновение не приводит к переходу на новые уровни.

Самосогласованное поле - поле, создаваемое всеми частицами. У каждого e^- своё самосогл. поле.
L - для атома, как целого
l - для отдельного, индивид. e^- $l = 0, 1, 2, 3, \dots$

Эл. уровни должны нумероваться каким-то числом -
- главное кв. число n $n = 1, 2, 3, \dots$ ($n = l+1, l+2, \dots$)

Чтобы задать сост. атома нужно кроме кв. чисел L, S, J, которые опис. атом как целое, еще и опис. каждого e^-.

Электронная конфигурация - полное задание атома.

Сост. e^- с задан. l и n вырождено с кратностью $2(2l+1)$

Замкнут. оболочка - полностью заполнена.
Электрон. оболочка - e^- с одинак. l.

Эквивалентные e^- - e^-, которые нах-ся в состояниях с одинак. n, l (их индивид-е состояния отличаются величинами проекций орбитального момента и спина)

Эмпирическое правило для опред. кв. чисел →
→ правило Хунда:
наименьшей эн.ей обладает терм с наиб. возможным при данной эл. конфигурации знач. S и наиб. возможным значением S значение L.

Определим терм из сист. 4х эквив.-х электронов:

Сначала табличка:

	m	σ
$\overline{I}$	1	1/2
$\overline{II}$	0	1/2
$\overline{III}$	-1	1/2
$\overline{IV}$	1	-1/2
$\overline{V}$	0	-1/2
$\overline{VI}$	-1	-1/2

m - проекц. орбит. момента e^- на ось квантования

σ - проекция спина

Рассм. возможные состоян. для $4^х$ e^- и $6^{ти}$:

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

$$M_L = \sum_i m_i$$

$$M_S = \sum_i \sigma_i$$

Начнем с состоян. с самым большим кв. числом.

7

$$\left.\begin{matrix} |20\rangle \\ |10\rangle \\ |00\rangle \end{matrix}\right\} \nearrow {}^1D \qquad \left.\begin{matrix} |11\rangle \\ |01\rangle \\ |10\rangle \\ |00\rangle \end{matrix}\right\} {}^3P \qquad |00\rangle\ {}^1S$$

Ответ: ^1D, $\boxed{^3P}$, ^1S ← самое низколежащее состояние

с.4

§ 3 Водородоподобные уровни энергии

$$[\hat{\vec{l}}^2, \hat{\vec{\mathcal{E}}}] \neq 0$$

Для атома водорода $E_n = -\dfrac{mZ^2e^4}{2\hbar^2 n^2}$ - вырожд. по l т.к. ин вектор Рунге - Ленц

Возьмем
- He у него два e^-. Один „удалим" - ион руем – сделаем ион: He^+
- Li - дважды ионизируем Li^{++}

как наз-ся?

Представим, что есть многоэлектр. атом и оди e^- переведем в оч. высокое состоян. – водородопо Такое состоян. хорошо опис. формулой (Эмпир

$$E_{nl} = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2(n+\Delta_l)^2}$$

Δ_l - поправка Ридберга

Удобно польз-ся атомными ед-ми:

$a_0 = \dfrac{\hbar^2}{m_e e^2}$ – радиус $1^й$ боровской орбиты

§ 4 Самосогласованное поле (С 245

поле атома, создаваемое всеми частицами.

Метод, используемый Хартри и Фоком - приближ-й метод — **метод Хартри-Фока** (вариационный)

Задача: построить волнов. функц. атома.
У нас дискретн. спектр.

Можем записать: $\hat{H}\Psi_n = E_n \Psi_n$

Предпол., что уровни нормированы: $\int dq\, \Psi_m^* \Psi_n = \delta_{mn}$

Пусть атом нах-ся в сост. опис. волн. ф. Ψ, мы можем её разложить:

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

Подставим наши разложения:

$$\int dq\, \Psi^* \Psi = \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=1}^{\infty} a_n^* a_m \int dq\, \Psi_m^* \Psi_n = \sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 = 1$$

Запишем собств. знач. гамильт-на:

$$\int dq\, \Psi^* \hat{H} \Psi = \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=1}^{\infty} a_n^* a_m \int dq\, \Psi_n^* \hat{H} \Psi_m = \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=1}^{\infty} a_n^* a_m E_m \int dq\, \Psi_n^* \Psi_m =$$

$= \|$ символ Кронекера → суммиров. $\| = \sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 E_n \geq E_1$

Т.к. дискр. спектр → у нас есть миним. уровень энергии

$E_n \geq E_1$

Отыскание эн. основн. состоян. E_1 сводится к нахожд. min-ма функционала:

Задача: $E_1 = \min \int dq\, \Psi^* \hat{H} \Psi$

min-е знач. величины, но при доп. условии:

$\int dq\, \Psi^* \Psi = 1$

Сформулируем в вариац. виде:

$$\begin{cases} \delta \int dq\, \Psi^* \hat{H} \Psi = 0 \\ \int dq\, \Psi^* \Psi = 1 \end{cases}$$

Чтобы решить эту задачу нужно конкретизовать, что такое гамильт. атома.

$\hat{H} = \sum \hat{H}_k + \frac{1}{2}\sum_{k\neq l} \hat{V}_{kl}$, $\hat{H}_k$ - гамильт. 1-го e^-, движ-ся в самосогл. поле.

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

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

← взаимод. e^- с другими e^-

Успех задачи зависит от $1^{ой}$ **пробной функции** (затравочная функц.) - нулевое приближ. А дальше воспользуемся итерац. методам.

Чтобы решать задачу, нужно поставить **условия на волн. функцию**:

① волн. ф. для самосогл. поля нужно сконструировать из одночаст. ф.

② одночаст. ф. нужно выбрать так, чтобы нач. энергия была min

③ волн. ф. должна быть антисим-ой - мы НЕ будем этого делать.

Метод Хартри-Фока - метод без антисимметризации волн. ф.

Выбираем пробн. функцию:

движ. каждого e^- независимо

$$\Psi = \varphi_1(\vec{r}_1)\,\varphi_2(\vec{r}_2)\dots\varphi_Z(\vec{r}_Z), \qquad \int d^3r_i\,|\varphi_i(\vec{r}_i)|^2 = 1$$

модель независимых частиц

Займемся вычисл. вариацией:

$$\int dq\,\Psi^*\hat{H}\Psi = \sum_k\int\varphi_k^*(\vec{r}_k)\,\hat{H}_k\,\varphi_k(\vec{r}_k)\,d^3r_k + \frac{1}{2}\overset{k\neq l}{\sum_{k,l}{}'}\int d^3r_k\,d^3r_l\,\varphi_k^*\varphi_l^*\hat{V}_{kl}\varphi_k\varphi_l$$

Нужно проварьировать, но сначала:

$$\delta\int dq\,\Psi^*\hat{H}\Psi = \int dq\,\underset{=0}{\delta\Psi^*}\hat{H}\Psi + \int dq\,\Psi^*\hat{H}\,\underset{=0}{\delta\Psi} = 0$$

вариации $\delta\Psi^*$ и $\delta\Psi$ - не зависимы → кажд. часть $=0$

Нужно добавить доп. условие. Проварьируем:

$$\delta\int dq\,\Psi^*\Psi = 0,\quad \int dq\,\underset{=0}{\delta\Psi^*}\Psi + \int dq\,\Psi^*\underset{=0}{\delta\Psi} = 0$$

Можно брать любую пару → дадут одинак. ур-я:

$$\delta\int dq\,\Psi^*\hat{H}\Psi \to \sum_k\int\delta\varphi_k^*\hat{H}_k\varphi_k\,d^3r_k + \sum_{k,l}{}'\int d^3r_k\,d^3r_l\,\delta\varphi_k^*\varphi_l^*\hat{V}_{kl}\,\varphi_k\varphi_l =$$

1/2 исчезает, т.к. поменяли индексы суммирования (варьировали φ_l и φ_k → сократ-сь)

$$= \sum_k\delta\varphi_k^*\int d^3r_k\left\{\hat{H}_k + \sum_l{}'\int d^3r_l\,\varphi_l^*\hat{V}_{kl}\varphi_l\right\}\varphi_k = 0$$

Не учли доп. условие: умножим на произв. const, т.к. оно равно нулю.

★ $$\sum_k\delta\varphi_k^*\int d^3r_k\left\{\hat{H}_k + \sum_l{}'\int d^3r_l\,\varphi_l^*\hat{V}_{kl}\varphi_l - \varepsilon_k\right\}\varphi_k = 0$$

произвольный множитель Лагранжа - та произвольная const, на которую мы умножали нашу вариацию.

Чтобы выраж.(★) равн-сь 0, выраж. в $\{\}$ должно $=0$

$$\left(\hat{H}_k + \overset{\textcircled{1}}{\boxed{\sum{}'\int d^3r_l\,\varphi_l^*\,\hat{V}_{kl}\,\varphi_l}} - \varepsilon_k\right)\varphi_k = 0$$

сист. связанных интегро-дифф. ур-й, т.к. $k = 1, \dots, Z$

В кач. пробн. ф. обычно использ-ся водородоподобн. функции:

$$\hat{H}_k\,\varphi_k^{(0)} = \varepsilon_k^{(0)}\varphi_k^{(0)}$$

Велич. ① играет роль потенц. энергии

$$V_k^{(0)}(\vec{r}_k)=\sum_l{}'\int d^3r_l\, \varphi_l^{(0)*}(\vec{r}_l)\,\hat{V}_{kl}\,\varphi_l^{(0)}(\vec{r}_l)$$ – потенц. эн. в 0^вом прибл.

Подставим в исходное ур-е:

$$(\hat{H}_k+V_k^{(0)}(\vec{r}_k)-\mathcal{E}_k^{(1)})\,\varphi_k^{(1)}(\vec{r}_k)=0$$

$$V_k^{(1)}(\vec{r}_k)=\sum_l{}'\int d^3r_l\,\varphi_l^{(1)*}(\vec{r}_l)\,\hat{V}_{kl}\,\varphi_l^{(1)}(\vec{r}_l)$$

$$(\hat{H}_k+V_k^{(1)}(\vec{r}_k)-\mathcal{E}_k^{(2)})\,\varphi_k^{(2)}(\vec{r}_k)=0$$

До каких пор делать итерации? Задается точность

$V_k(\vec{r}_k)$ $\quad (\hat{H}_k+V_k-\mathcal{E}_k)\varphi_k=0$ – выражение Хартри-Фока

V_k после того, как мы выполнили определенное число итераций и оно не меняется – самосогласованное поле.

Метод Хартри-Фока использ-ся для описания атомных ядер.

$\mathcal{E}_k$ – одночастичная энергия, энергия $k^{го}$ электрона.

$$\mathcal{E}_k=\int d^3r\,\varphi_k^*\hat{H}_k\varphi_k+\sum_l{}'\int d^3r_k\,d^3r_l\,\varphi_k^*\varphi_l^*\hat{V}_{kl}\varphi_k\varphi_l$$

можем записать в представл. Дирака:

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

$$\hat{H}=\sum_k\hat{H}_k+\frac{1}{2}\sum_{k,l}{}'V_{kl}$$

$$E_1=\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle=\sum_k\langle k|\hat{H}_k|k\rangle+\frac{1}{2}\sum_l{}'\langle kl|\hat{V}_{kl}|kl\rangle$$

Сравним E_1 и $\mathcal{E}_k$:

$$E_1=\sum_k\mathcal{E}_k-\frac{1}{2}\sum_l{}'\langle kl|\hat{V}_{kl}|kl\rangle$$

§ 5 Рентгеновские термы

?

Терм – атомный уровень энергии.

- взяли ионизировали атом → → выбили e^- → дырка в электр. структуре.
- излучен фотон

дырка может быть заполнена при переходе с более высокого уровня → эн. уменьшается → атом излучает энергию.

Классификация термов:

(спец. символы)

$^{K}1S_{1/2}$	$^{L}2S_{1/2}$	$^{L}2p_{1/2}$	$^{L}2p_{3/2}$	$^{M}3S_{1/2}$	$^{M}3p_{1/2}$	$3p_{3/2}$	3d
K	L_{I}	L_{II}	L_{III}	M_{I}	M_{II}	M_{III}	M

- Учет релят-х эффектов приводит:

(n, l) j-разные

Н-р: (L_{II}, L_{III}) - пара уровней, раздел-я за счет релят-х эффектов.

(M_{II}, M_{III})

→ релятивистские
→ регулярные

дублеты

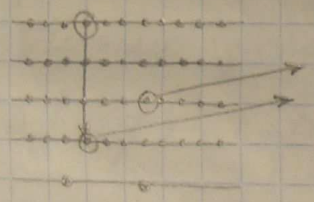
- Отклонение поля ядра (Кулоновского) приводит: различн. экранировка ядра.

(n, j) l-разные

Н-р: $\underbrace{(L_{I}, L_{II})\ ;(M_{I}, M_{II})}$ - экранировочные
- иррегулярные

дублеты

Можно сделать много дырок в электр. структуре:



излуч. нет в таком процессе
→ выбит еще один e^-

2 дырки 1 частица 2h 1p

Эффект Оже

. 09.
012г

§6 Статистический метод Томаса-Ферми

Метод основан на квазиклас. приближ., т.к. большие кв. числа → 1. можем писать импульс, как функци координаты; 2. используем понятие элемента фазового объёма

Начнем с числа состоян. в элем. фазового объёма:

$$dN = 2\frac{d^3r\ d^3p}{(2\pi\hbar)^3}$$; умн. на 2, т.к. частица имеет спин → 2 состоян.

Нас интерес. завис. от $r \to \int d^3p$

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

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

С другой стороны dN можно определить из плотности электронов $n(\vec{r})$

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

Приравняем: ① $n(\vec{r}) = \frac{p_0^3(\vec{r})}{3\pi^2 \hbar^3}$

Пот. эн. e^- в атоме в точке r: e^- движ. в электр. поле:

$E = -e\varphi(\vec{r})$; $e \equiv |e|$

max эн. электр. в атоме $-e\varphi_0$ - должна быть постоянна во всем V атома, если бы не так, то все e^- стекались бы в те точки где эн. меньше.

Полная энергия: $\frac{p^2}{2m} - e\varphi(\vec{r})$

max полн. энергия: $\frac{p_0^2(\vec{r})}{2m} - e\varphi(\vec{r}) = -e\varphi_0$

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

$p_0(\vec{r})$ подставим в ①:

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

Нужно определить электростатич. потенциал $\varphi(\vec{r})$:

→ пишем ур-е Пуассона:

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

$\rho(\vec{r}) = -e\, n(\vec{r})$

$\Delta\varphi(\vec{r}) = 4\pi e\, n(\vec{r})$ => подставляем $n(\vec{r})$:

Атом сферически-симметричен, тогда от Δ останется только радиальн. часть <= предположим

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

↗ ур-е Томаса-Ферми - нельзя решить в элем. функц.

Нужно перейти к безразм. величинам

$$\frac{1\cdot \cancel{Z}e}{b^{2}\cancel{Z}^{-2/3-1}}\frac{1}{x^2}\frac{d}{dx}\left(x^2\frac{d}{dx}\frac{\Phi(x)}{x}\right)=\frac{4e(2me)}{b^{3/2}\cancel{Z}^{-1/2}x^{3/2}\,3\pi\hbar^3}$$

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

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

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

$x^{1/2}\Phi''(x)=\Phi^{3/2}(x)$ - 2я запись ур-я Томаса - Ферми

$\Phi(x)$ - универс-я; одинак для всех атомов
не зависит от Z

Нужно дополнить гран. условиями:

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

при $r\to 0$ пот. энергия должна стремиться
к пот. энергии ядра.

$r\to 0\quad \lim\limits_{r\to 0} r[\varphi(r)-\varphi_0]=Ze$

$$\Phi(0)=1\ ,\ \Phi(\infty)=0$$

Это ур-е аналитически решить нельзя!

Вспомним условие применимости квазиклассического
приближения:

$$\frac{m\hbar|F|}{|p|^3}\ll 1\quad ,\ F\text{- сила}$$

$F=-\dfrac{dU(r)}{dr}$; $U(r)=-\dfrac{Ze^2}{r}$ - потенциал ядра

$$|p|\sim\sqrt{2m|U|}=\sqrt{\frac{2mZe^2}{r}}$$

$$|F|=\left|\frac{dU}{dr}\right|\sim\frac{Ze^2}{r^2}$$

Подставляем всё в условие примен-ти:

$$\frac{m\hbar Ze^2\,r^{3/2}}{r^2(2mZ)^{3/2}e^3}\ll 1$$

$$\frac{Z\hbar}{r^{1/2}2^{3/2}m^{1/2}Z^{3/2}e}\ll 1 \quad \text{/ опустим}$$

$$r^{1/2}\gg\frac{\hbar}{m^{1/2}Z^{1/2}e}\Rightarrow r\gg\frac{\hbar^2}{}$$

- при больших r будет большая де Бройл волна- нарушено условие квазикл-ти.

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

§ 7 Тонкая структура атомных уровней

За пределами нерел. физики- релят-е эффекты.

Чтобы опред. тонкую структ. нужно учесть спины → возникнут члены пот. энергии.- скаляр.

- Чтобы получить скаляр- нужно умножить один псевдовектор на другой.

① $\hat{\vec{l}}_k \hat{\vec{S}}_k$ - спинорбитальное взаимод-е: $\sum_k \alpha_k \hat{\vec{l}}_k \hat{\vec{S}}_k = \hat{U}$

- - взять произведение 2-х

$\hat{\vec{S}}_i \hat{\vec{S}}_k$ - спин-спиновое взаимод-е

Мы имеем дело с S, L, J → ① нужно усреднить. Делается это в два этапа.

1. $\hat{U} = A\hat{\vec{S}}\hat{\vec{L}}$ - усреднение - переход от опер. отд. электр. с опер. атома.
2. $\hat{\vec{S}} + \hat{\vec{L}} = \hat{\vec{J}}$, $\hat{\vec{S}}^2 + \hat{\vec{L}}^2 + 2\hat{\vec{S}}\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{J}}^2$

$$\hat{\vec{S}}\hat{\vec{L}} = \frac{1}{2}\left[\hat{\vec{J}}^2 - \hat{\vec{S}}^2 - \hat{\vec{L}}^2\right]$$

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

$$E_J = \frac{1}{2}AJ(J+1)$$

Найдем расст. м/у соседними уровнями мультипл.:

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

A может быть и „+" и „-":

- A>0 → мультиплет $\underset{\text{верхн.}}{\boxed{L+S}} \ll J \ll |L-S|$ - нормальный
- A<0 → мультиплет: $L+S \le J \ll \underset{\text{верхн.}}{\boxed{|L-S|}}$ - обращенный

Эмпирическое правило: (Хунда

если в оболочке нах-ся не более половины мах-возможного для нее числа e^-, то $J = |L-S|$.

если же оболочка заполнена более чем на

$a_0 = \frac{\hbar^2}{2me^2} \sim 0,529 \cdot 10^{-10}$ м ; $t_0 = \frac{\hbar^3}{me^4} \sim 2,42 \cdot 10^{-17}$ с ; $\varepsilon_0 = \frac{me^4}{\hbar^2} \sim 4,36 \cdot 10^{-18}$ Дж $= 27,21$ эВ

- из членов, квадратичных по спину.

$$\hat{U} = B(\hat{\vec{L}}\hat{\vec{S}})^2$$

$$\tilde{E}_J = \frac{1}{4} B J^2 (J+1)^2$$

Мы подразумевали

$$\left.\begin{array}{l} \hat{\vec{s}}_i \to \hat{\vec{S}} \\ \hat{\vec{l}}_i \to \hat{\vec{L}} \\ \hat{\vec{S}} + \hat{\vec{L}} = \hat{\vec{J}} \end{array}\right\}$$

L-S связь
(рассель-саундерсовская)
в легких атомах

На самом деле должно быть:

$$\left.\begin{array}{l} \hat{\vec{j}}_i = \hat{\vec{s}}_i + \hat{\vec{l}}_i \\ \hat{\vec{j}}_i \to \hat{\vec{J}} \end{array}\right\}$$

j-j связь
в тяж. приближается к j-j, а на самом деле в чистом виде не сущ.

§ 8 Периодическая система элементов Менделеева

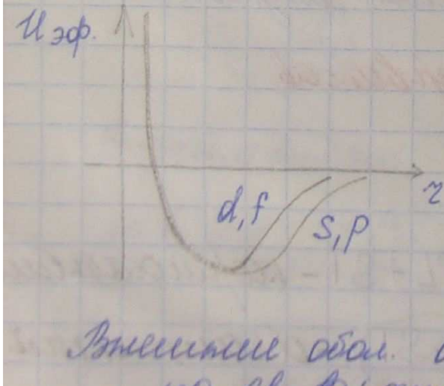
1869г - Дм. Ив. установил периодич. закон.

1921-1922г - Н. Бор объяснил периодичность → N.p.

Менделеев предсказал ~ 10 элем. и их св-ва, сказал в каких рудах искать.

С точки зрения кв. мех при переходе от одного атома к соседнему, на 1 большего, добавляется 1 электрон.

Сначала заполняются S обол. с орбит. мом = 0 → p с орбит. мом. = 1 → d ...



Uэф. - эф. энергия e^- в атоме = кул. эн. + центробежн. эн.

r - функц. расстояния

Внешние обол. атомов содержат s и p e^- - они влияют на св-ва (химические

d и f - не влияют!

$^{2S+1}L_J$

$_3$Li $1s^2 2s$ $L=0$ $S=1/2$ $^{2}S_{1/2}$

$_4$Be $1s^2 2s^2$ $L=0$ $S=0$ $^{1}S_0$

$_5$B $1s^2 2s^2 2p$ $L=1$; $S=\frac{1}{2}$; $J=\frac{1}{2}$ $^{2}P_{1/2}$

$_6$C $1s^2 2s^2 2p^2$ $\underset{1}{\uparrow}\underset{0}{\uparrow}$ $L=1$; $S=1$; $J=0$ $^{3}P_0$

по правилу Хунда → выбрали ориентацию в одном направл.
орбитальные моменты должны быть разные.

$_7$N $1s^2 2s^2 2p^3$ $\underset{1}{\uparrow}\underset{0}{\uparrow}\underset{-1}{\uparrow}$ $L=0$; $S=3/2$; $J=3/2$ $^{4}S_{3/2}$

оболочка заполнена точно на половину

$_8$O $1s^2 2s^2 2p^4$ $\underset{1}{\uparrow}\underset{0}{\uparrow}\underset{-1}{\uparrow}\underset{1}{\downarrow}$ $L=1$; $S=1$; $J=2$ $^{3}P_2$

заполнена боле чем на половину

$_9$F $1s^2 2s^2 2p^5$ $\underset{1}{\uparrow}\underset{0}{\uparrow}\underset{-1}{\uparrow}\underset{1}{\downarrow}\underset{0}{\downarrow}$ $L=1$; $S=1/2$; $J=3/2$ $^{2}P_{3/2}$

$_{10}$Ne * $1s^2 2s^2 2p^6$ $\underset{1}{\uparrow}\underset{0}{\uparrow}\underset{-1}{\uparrow}\underset{1}{\downarrow}\underset{0}{\downarrow}\underset{-1}{\downarrow}$ $L=0$; $S=0$; $J=0$ $^{1}S_0$

$_{11}$Na * $1s^2 2s^2 2p^6 3s$

12 Mg $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$

13 Al $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$

14 Si $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$

15 P $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$

16 S $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$

17 Cl $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$

18 Ar $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

19 K $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$

20 Ca $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$

21 Sc $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d$
$L=2$; $S=1/2$; $J=3/2$ $^{2}D_{3/2}$

22 Ti $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^2$
$\underset{2}{\uparrow}\underset{1}{\uparrow}$ $L=3$; $S=1$; $J=2$ $^{3}F_2$

23 V $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^3$
$\underset{2}{\uparrow}\underset{1}{\uparrow}\underset{0}{\uparrow}$ $L=3$; $S=3/2$; $J=3/2$ $^{4}F_{3/2}$

искл.

24 Cr $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^5$
$\underset{2}{\uparrow}\underset{1}{\uparrow}\underset{0}{\uparrow}\underset{-1}{\uparrow}\underset{-2}{\uparrow}$ $\left\{\begin{array}{l} L=0;\ S=5/2 \Leftarrow \text{для } d \\ L=0;\ S=3;\ J=3 \Leftarrow \text{сум-й} \end{array}\right.$ $^{7}S_3$

Mn … $4s^2\ 3d^5$ ^{6}S

27 Co … $3d^7$
$\underset{2}{\uparrow}\underset{1}{\uparrow}\underset{0}{\uparrow}\underset{-1}{\uparrow}\underset{-2}{\uparrow}\underset{2}{\downarrow}\underset{1}{\downarrow}$ $L=3$; $S=\frac{3}{2}$; $J=\frac{9}{2}$ $^{4}F_{9/2}$

28 Ni … $3d^8$
$\underset{2}{\uparrow}\underset{1}{\uparrow}\underset{0}{\uparrow}\underset{-1}{\uparrow}\underset{-2}{\uparrow}\underset{2}{\downarrow}\underset{1}{\downarrow}\underset{0}{\downarrow}$ $L=3$; $S=1$; $J=4$ $^{3}F_4$

29 Cu … $4s^1 3d^{10}$ $^{2}S_{1/2}$ $L=0$ $S=1/2$ $J=1/2$

30 Zn … $4s^2 3d^{10}$ $L=0$; $S=0$; $J=0$

31 Ga … $4s^2 3d^{10} 4p$

32 Ge … $4p^2$

33 As … $4p^3$

34 Se … $4p^4$

35 Br … $4p^5$

36 Kr … $4p^6$

$L=0 = S^2 \rightarrow \underset{0}{\uparrow}\underset{0}{\downarrow}$

$L=1 = P^6 \rightarrow \underset{1}{\uparrow}\underset{0}{\uparrow}\underset{-1}{\uparrow}\underset{1}{\downarrow}\underset{0}{\downarrow}\underset{-1}{\downarrow}$

$L=2 = D^{10} \rightarrow \underset{2}{\uparrow}\underset{1}{\uparrow}\underset{0}{\uparrow}\underset{-1}{\uparrow}\underset{-2}{\uparrow}\underset{2}{\downarrow}\underset{1}{\downarrow}\underset{0}{\downarrow}\underset{-1}{\downarrow}\underset{-2}{\downarrow}$

Элементы, у кот. заполнение s и p обол. - элем. главных групп
d и f обол. - элем. промежуточных групп

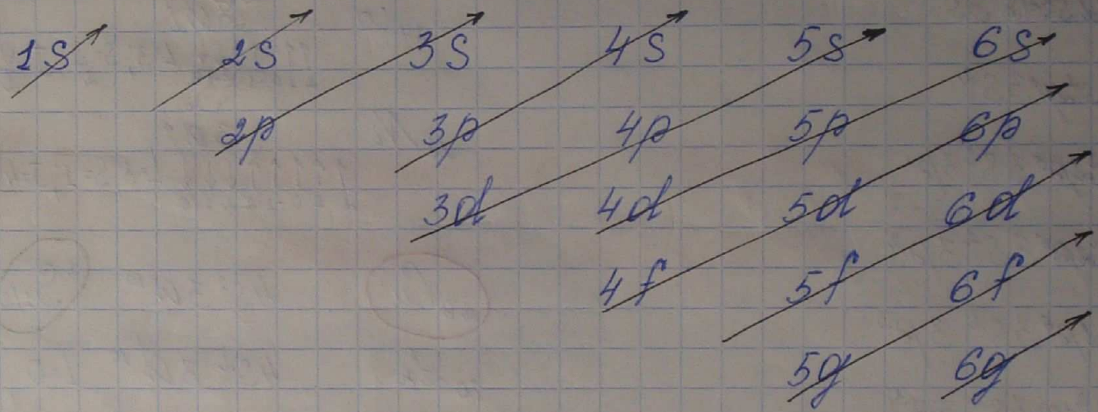
3d - железо
4d - палладий
5d - платина

4f - лантаноиды
5f - актиноиды

Ме ↓ ↙ газы

1	$_1H$							$_2He$
2	$_3Li$	$_4Be$	$_5B$	$_6C$	$_7N$	$_8O$	$_9F$	$_{10}Ne$
3	$_{11}Na$	$_{12}Mg$	$_{13}Al$	$_{14}Si$	$_{15}P$	$_{16}S$	$_{17}Cl$	$_{18}Ar$
4	$_{19}K$	$_{20}Ca$						
5	$_{29}Cu$	$_{30}Zn$	$_{31}Ga$	$_{32}Ge$	$_{33}As$	$_{34}Se$	$_{35}Br$	$_{36}Kr$
	$^2S_{1/2}$	$^1S_0$	$^2P_{1/2}$	$^3P_0$	$^4S_{3/2}$	$^3P_2$	$^2P_{3/2}$	$^1S_0$

Заполнение уровней происходит по схеме:



§ 9 Мультипольные моменты

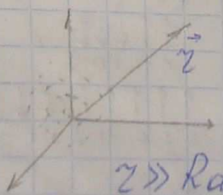
/ с.262

Если есть система точечных зарядов, то кроме суммарного момента возникают мультипольн. моменты.

У атома заряд нейтральный.

3.10. 2012г. Если сист. имеет конечн. размеры в ней могут возникнуть мультип. моменты.

В **клас.** механике электростат. потенциал: $\varphi(\vec r)$



заряд $1^{го}$ электр.

$$\varphi(\vec r) = \sum_{\alpha=1}^{Z} \frac{e_\alpha}{|\vec r - \vec r_\alpha|}$$

радиус-вектор $\alpha^{й}$ частицы

$r \gg R_{ат}$. Если расст. большие, потенц. можно разложить в ряд:

$$\varphi(\vec r) = \sum_{\alpha=1}^{Z} \frac{e_\alpha}{|\vec r - \vec r_\alpha|} \approx \frac{q}{r} + \frac{\vec d \vec r}{r^3} + \frac{1}{6} \sum Q_{ik} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_k} \frac{1}{r} +$$

q - полный заряд системы

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

$\vec{d}$ - дипольный момент

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

Q_{jk} - тензор квадруп. момента

$$Q_{jk} = \sum_{\alpha=1}^{Z} e_\alpha \left[3 x_j^{(\alpha)} x_k^{(\alpha)} - \delta_{jk} \vec{r}_\alpha^{\,2} \right]$$ - тензор симметричен по j, k

выбирается из тех сообр., чтобы Sp выражения равнялся нулю.

$$\overset{Sp}{\sum_k Q_{kk}} = 0 \ , \quad \overset{\text{симметрия}}{Q_{jk} = Q_{kj}}$$

Чтобы перейти к кв. мех. нужно перейти от величин к операторам.

Мы работаем в коорд-м представлении: оператор коорд. совпад. с координатой.

- $$\langle \Psi_f | \hat{\vec{d}} | \Psi_i \rangle = \sum_{\alpha=1}^{Z} e_\alpha \int d^3r_1\, d^3r_2 \ldots d^3r_\alpha \ldots d^3r_Z$$ ← умножение

Ψ_f - функц. конечн. состояния атома

Ψ_i - функц. нач. состояния

$$\cdot\ \Psi_f^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots \vec{r}_\alpha, \ldots \vec{r}_Z)\, \vec{r}_\alpha\, \Psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots \vec{r}_\alpha, \ldots \vec{r}_Z)$$

Введем величину:

$$\rho_{if}(\vec{r}_\alpha) = \int d^3r_1\, d^3r_2 \ldots d^3r_{\alpha-1}\, d^3r_{\alpha+1} \ldots d^3r_Z\, \Psi_f^*(\ )\, \Psi_i(\ )$$

↳ переходная плотность

if конечн. состоян. совпад. с начальным $f = i$ =>

$$\Rightarrow \rho_{ii}(\vec{r}_\alpha) = \rho(\vec{r}_\alpha)$$ - одночастичная плотность

$$\langle \Psi_i | \hat{\vec{d}} | \Psi_i \rangle = \sum_{\alpha=1}^{Z} e_\alpha \int d^3r_\alpha\, \vec{r}_\alpha\, \rho(\vec{r}_\alpha) = 0$$

if сист. облад. опред. чётностью, что при замене всех величин - волн. ф. либо остаётся неизменной либо изменит знаки => среднее знач. $\vec{d} = 0$ (не мож. равняться сама себе)

- $\langle \Psi_f | \hat{Q}_{jk} | \Psi_i \rangle$, $\langle \Psi_i | \hat{Q}_{jk} | \Psi_i \rangle$ - усредняем в II этапа

усредним по сост. атома $\underset{\frown}{с}$ определ. знач. полного момента. А мы знаем: $\hat{J}$, (J, M_J)

Опер. квадруп. мом. может выраж-ся только через компоненты полного мом. (комп. не коммутир. друг с другом) член кот. нужно вычесть, чтобы $Sp=0$

$$\hat{Q}_{jk} = C\left(\hat{J}_j \hat{J}_k + \hat{J}_k \hat{J}_j - \frac{2}{3}\delta_{jk}\hat{\vec{J}}^2\right)$$ – симметричн. тензор $\overline{II}$ ранга с $Sp=0$

if $J=0$ $\hat{Q}_{jk}=0$ матр. Паули?

if $J=\frac{1}{2}$ $\hat{\vec{J}}^2 = \frac{1}{4}\hat{\vec{\sigma}}^2 = \frac{3}{4}$

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

$$\hat{Q}_{jk} = 0$$

Комп. квадруп. момента будут отличны от нуля толь если $J \neq 0, 1/2$

Найдем нормировочную **const**:

Средн. знач. квадруп. момента $Q = \langle \hat{Q}_{zz} \rangle = \langle JJ | \hat{Q} | JJ \rangle$

$M_J = J$

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

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

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

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

$$\hat{Q}_{jk} = \frac{3Q}{2J(2J-1)}\left(\hat{J}_j \hat{J}_k + \hat{J}_k \hat{J}_j - \frac{2}{3}\delta_{jk}\hat{\vec{J}}^2\right); \text{ if } J\neq 0; J \neq 1/2$$

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

$$\langle \hat{J}_z \rangle = M, \quad \langle \hat{Q}_{zz} \rangle = \frac{3Q}{J(2J-1)}\left(M^2 - \frac{1}{3}J(J+1)\right); \quad J \neq 0, J \neq 1/2$$

§ 10 Атом в электрическом поле

С 266

Эксперимент впервые сделал Штарк.
Будем рассм. в достаточно слабом поле по сравнению с внутриатомными эл. полями.

$\mathcal{E}_0 = \frac{e}{a_0^2}$ ← радиус 1-й бор-й орбиты $\sim 5,1 \cdot 10^{\overset{=11}{9}} \frac{в}{см}$

→ характерная величина внутриат. эл. поля

$\mathcal{E} \leq 10^5$ в/см $\leq \mathcal{E}_0$

Атом помещ. во внешн. эл. поле → есть выдел. направл. Поле физ. системы не явл. центрально-сим => НЕ сохр. полн. момент, а сохр. проекция момента на направл. поля M_J. Состоян. с разн. M_J - облад. разн. энергией. Снятие вырождения по M_J будет не полным, т.к. атом симметричен по отнош. к отражению. Состояния возникающие при отражении - одинаковы, а M_J меняет знак.

Состояния с M_J и $-M_J$ облад. одинак. энергией.

Когда помещ.аем сист. зарядов в эл. поле происх. деформация системы - поляризуемость.

в направл. поля

Оператор возмущения: $\hat{V} = -\hat{\vec{d}}\vec{\mathcal{E}} = -\hat{d}_z \mathcal{E}$

$\hat{H} = \hat{H}_0 - \hat{d}_z \mathcal{E}$

Волн. ф. атома обладает опред. четность в атоме хар-ся (n, l) => $\Psi_{nl}(\vec{r})$ - волн. ф. многоэл. атома

Волновая ф. в нулевом приближении (без возмущений)

$$\Psi^{(0)}_{nl}(\vec{r}) = \sum_{m=-l}^{l} C_m \varphi^{(0)}_{nlm}(\vec{r})$$

в 1м приближ. поправка $= 0 \Rightarrow \langle \hat{d}_z \rangle = 0$

Поправку нужно искать во 2м приближ. теории возмущ.

$$\Delta E_n = -\sum_m{}' \sum_{i,k} \frac{(d_i)_{nm}(d_k)_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \mathcal{E}_i \mathcal{E}_k = -\frac{1}{2}\sum_{i,k} \alpha_{ik}^{(n)} \mathcal{E}_i \mathcal{E}_k$$

введем: $\alpha_{ik}^{(n)} = 2\sum_m{}' \frac{(d_i)_{nm}(d_k)_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$ - тензор поляризуемости

$$\boxed{\Delta E_n = -\frac{1}{2}\alpha_{zz}^{(n)} \mathcal{E}^2}$$

Эффект квадратичен по полю, кроме водорода

Энергия уровней атома водорода вырожд. и по n, и по l

$(-1)^l$ - четность с опред. l

$$\Psi_n^{(0)}(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\rightarrow} \sum_{m=-l}^{l} C_{lm} \varphi^{(0)}_{nlm}(\vec{r})$$

суперпозиция состояний с разными l → состоян. не облад. опред. четностью →

→ $\langle \hat{d}_z \rangle \neq 0$

$\Delta E_n \sim \mathcal{E}$ - для атома водорода, т.к. вырожд. по l

10.10.
2012г

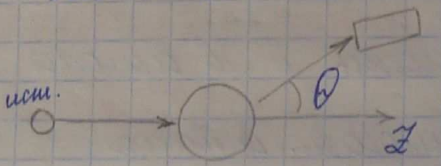
Глава -2- Упругое и неупругое рассеяние

§ 11 Общая теория рассеяния

Все задачи имеют дело с непрерывным спектром.

Кв. теория рассеян. принц. отлич. от классич-й, т. нет понятия траектории - можем указать только вероятность.

Будем предполагать, для удобства, что источник частиц нах-ся на $-\infty$



θ- угол рассеяния

В кв. мех. своб. частице сопоставляется плоская волна

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

Как нормир. эта волн. функц.? Вычислим плотность потока вер-ти волны:

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

$$|\vec{j}_{пад.}| = \frac{\hbar k}{2m} = v$$

?

волн. ф. нормирована таким образом, что плотн. потока вер-ти по абс. величине численно равна скорости.

?

Посмотрим асимптотику вдали от рассеивателя, где потенциал мал либо пренебрежимым:

$$r \to \infty \quad R_{kl}(r) \sim \frac{\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)}{kr} \longrightarrow$$

это стоячая волна, а при рассеив-и нам нужна бегущ

$$\longrightarrow \overset{1}{A}\,\frac{e^{ikr}}{r} + \overset{2}{B}\,\frac{e^{-ikr}}{r}$$

сферически-расходящаяся волна (рассеивающиеся част

сферич.-сходящаяся

Чтобы узнать какая волна нужно посчитать плотность потока вероятности:

$$\vec{j} - \hbar k \quad \vec{r} \quad \vec{v} \qquad \vec{j} \quad \vec{v}$$

при $r \to \infty$ волн. ф. должна иметь опред. асимптотику. (обяз. плоская волна + сфер.-расх. и перед ней коэф., зависящий от угла рассеян.)

$$\psi(\vec{r}) \sim e^{ikz} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}$$ – граничн. условие для задач рассеяния ↳ волн. ф. должна быть суперпозицией плоской и сф.-расх.

$f(\theta)$ – амплитуда рассеян.; имеет разм-ть длины $[м]$

$$|\vec{j}_{рас.}| = \frac{v}{r^2}|f(\theta)|^2$$

Вер-ть пройти частице пов-ть $dS = r^2 d\Omega$ в ед. времени:

$$|\vec{j}_{рас.}|dS = v|f(\theta)|^2 d\Omega$$, но удобнее:

$$d\sigma = \frac{|\vec{j}_{рас.}|dS}{|\vec{j}_{над.}|} = |f(\theta)|^2 d\Omega$$ – дифференц. сечение рассеяния $[м^2]$

Но в $[м^2]$ измер. неудобно → барн:

$$\boxed{1\ БАРН = 10^{-24} см^2 = 10^{-28} м^2}$$

- if амплит. зависит только от полярного угла и не зависит от азимутального:

$$d\sigma = 2\pi|f(\theta)|^2 \sin\theta\, d\theta\,; \quad \sigma = \int d\sigma = 2\pi\int_0^{\pi} d\theta \sin\theta |f(\theta)|^2$$

Напишем полное ур-е Шредингера; будем считать, что $V(r)$

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

поле центрально-симметр. → орбит. момент будет сохр-ся.

Волн. ф. будем искать в виде разл. полиномов Лежандра:

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

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

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

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

прямые производные т.к. $V(r)$

$$r \to \infty \quad \underset{пол.\ эн.}{R_{kl}} \sim \frac{\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)}{kr},$$

if $V(r) \neq 0$ $$R_{kl} \sim \frac{\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right)}{kr}$$ – фаза рассеяния (зависит от l)

Книга!

Нужно найти разл. по полиномам Лежандра для п
кой волны:

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

нужно добавить ассимптотику $j_l(kr)$ на больших расст

$r \to \infty$ $j_l(kr) \sim \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2})}{kr}$ ← эту ассимпт. удобно запис
в виде суперпозиц. бегущих во

плоск волна

$$\Rightarrow \quad r \to \infty \quad e^{ikz} \sim \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left[(-1)^{l+1} e^{-ikr} + e^{ikr} \right] P_l(\cos\theta)$$

Запишем ассимпт-ку R_{kl}:

$$r \to \infty \quad ③ \; R_{kl}(r) \sim \frac{1}{2ikr} \left[(-i)^l e^{i(kr+\delta_l)} - i^l e^{-i(kr+\delta_l)} \right] -$$

ассимптотику Ψ:

$$r \to \infty \quad \Psi \sim \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} C_l \left[(-i)^l e^{i(kr+\delta_l)} - i^l e^{-i(kr+\delta_l)} \right] P_l(\cos\theta)$$

$$r \to \infty \quad ① \; \Psi \sim e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$$

Найдем амплитуду рассеяния:
(в ассимптотике сферич.-сходящ. волн быть не должно → при сфер.-сх. волне коэф. должен = „0“)

Из ① и ③ $\Rightarrow$ $-i^l e^{-i\delta_l} C_l - (2l+1)(-1)^{l+1} = 0$ $\Rightarrow$ найдем C_l:

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

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

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

Посмотрим ассимпт. вол. ф. на больших расст.:

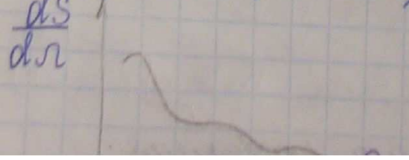
$$\Psi \sim \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left[e^{i(kr+2\delta_l)} + (-1)^{l+1} e^{-ikr} \right] P_l(\cos\theta)$$

$$\boxed{f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left[e^{2i\delta_l} - 1 \right] P_l(\cos\theta)}$$ – разл. ампл. рассе по парциальным волнам

формула Факсена - Хальтсмарка
(разложение по полин. Лежандра)

Сущ. роль играет $e^{2i\delta_l}$

Как находить фазы рассеяния:



будем подгонять кривую п
экспер. данные - фазовый

$S_l = e^{2i\delta_l}$; S_l - матричн. элем.

Введем $\hat{S}$ ← оператор рассеяния, налетающ. частицы опис. плоской волной, которыи превращ. налет. частицы в вылетающие

$$\Psi(\vec{r}) = \hat{S}\varphi(\vec{r})$$

Все возможн. переходы опред-ся: $\Psi(\vec{r}) - \varphi(\vec{r}) = (\hat{S}-1)\varphi(\vec{r})$

$\hat{S}$ - диаг. матричн. элем. ; диагонален по l

Свойства $\hat{S}$:

① $|\Psi(t=-\infty)|^2 = |\Psi(t=+\infty)|^2$, $\Psi(t=+\infty) = \hat{S}\Psi(t=-\infty)$

$|\hat{S}\varphi|^2 = 1$ $\quad \hat{S}^+\hat{S} = 1$ - унитарный опер-р - величину (унит-я матрица)

Этого опер-ра можно связ. с гамильтонианом:

$$\hat{S} = \lim_{\substack{t\to\infty \\ t_0\to-\infty}} \overset{\text{опер. эволюции}}{\hat{R}}(t, t_0)$$

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

Знаем, $d\sigma = |f(\theta)|^2 d\Omega$, $d\sigma = 2\pi|f(\theta)|^2 \sin\theta\, d\theta$.

Получим интегральную формулу:

вспомним форм. ортонормированности:

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

эластик (упругое)

$\sigma_e = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l$, δ_l подразум-ся вещ-м

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

$\sigma_e = \sum_l \sigma_l$, $\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2}(2l+1)\sin^2\delta_l$ - парциальное сечение

$f(\theta) = \sum_l (2l+1) f_l P_l(\cos\theta)$, $f_l = \frac{1}{2ik}(e^{2i\delta_l}-1)$, $f_l = \frac{1}{2ik}(S_l - 1)$ ← парц. амплит.

$f_l = \frac{e^{i\delta_l}}{k}\sin\delta_l$ ← парц. ампл. ; через фазы

$$(\sigma_l)_{max} = \frac{4\pi}{k^2}(2l+1)$$

17.10.
2012г

§ 12 Формула Борна

На больших расст. волновая ф. должна содержать плоскую волну и сферически-рассх.

Задачу в общем виде решить сложно. Будем решать приближенно!

Воспользуемся теорией возмущения, где будем считать что взаимодействие мало.

Есть одна частица пишем для неё:

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

т.к задача рассеяния → энергия положит. : $E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$

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

точное ур-е, как. точно решить нельзя. Будем считать, что правая часть мала.

$$\Delta\Psi^{(0)}(\vec r)+k^2\Psi^{(0)}(\vec r)=0 \qquad \Psi(\vec r)=\Psi^{(0)}(\vec r)+\Psi^{(1)}(\vec r)+\dots$$

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

Источник частиц нах-ся на „$-\infty$"

Нужно найти 1ю поправку к волн. ф. Подставим:

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

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

→ нужно разложить по полному набору собств-х ф. оператора Δ - плоские в

т.к. спектр непрер-й → инт. Фурье

$$U(\vec r)\Psi^{(0)}(\vec r)=\int d^3\varkappa\, e^{i\vec\varkappa\vec r}\chi(\vec\varkappa) \quad \text{обращение Фурье}$$

$$\chi(\vec\varkappa)=\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3r' e^{-i\vec\varkappa\vec r'}U(\vec r)\Psi^{(0)}(\vec r') \qquad (i\varkappa)^2=-\varkappa^2$$

Подставляем: $\Psi^{(1)}(\vec r)=\frac{2m}{\hbar^2}\int\frac{d^3\varkappa\, e^{i\vec\varkappa\vec r}}{k^2-\varkappa^2}\chi(\vec\varkappa)$

$$\Psi^{(1)}(\vec r)=\frac{2m}{\hbar^2}\boxed{\left[\frac{1}{(2\pi)^3}\int\frac{d^3\varkappa\, e^{i\vec\varkappa(\vec r-\vec r')}}{k^2-\varkappa^2}\right]}^{=G}U(\vec r')\Psi^{(0)}(\vec r')d^3r'$$

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

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

Нужно интегрировать по углам:

$$d^3\varkappa = \varkappa^2 \sin\theta_\varkappa \, d\varkappa \, d\theta_\varkappa \, d\varphi_\varkappa$$

$$\int_0^{2\pi} d\varphi_\varkappa \int_0^{\pi} d\theta_\varkappa \sin\theta_\varkappa \, e^{i\varkappa|\vec{r}-\vec{r}'|\cos\theta_\varkappa} = \left\| \begin{matrix} \cos\theta_\varkappa = t & ; \ t|_1^{-1} \\ -\sin\theta_\varkappa \, d\theta_\varkappa = dt & \end{matrix} \right\| =$$

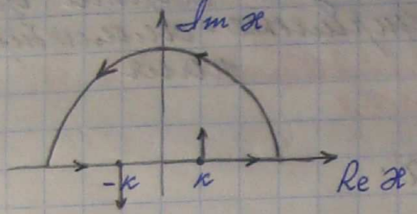
$$= 2\pi \int_{-1}^{1} dt \, e^{i\varkappa|\vec{r}-\vec{r}'|t} = \frac{2\pi}{i\varkappa|\vec{r}-\vec{r}'|}\left[e^{i\varkappa|\vec{r}-\vec{r}'|} - e^{-i\varkappa|\vec{r}-\vec{r}'|}\right]$$

$$G(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^2 i|\vec{r}-\vec{r}'|}\int_0^{\infty}\frac{d\varkappa\,\varkappa}{k^2-\varkappa^2}\left[e^{i\varkappa|\vec{r}-\vec{r}'|} - e^{-i\varkappa|\vec{r}-\vec{r}'|}\right] = \left\| \begin{matrix} \text{у нас 2 инт-ла} \\ \text{1-й без изменений} \\ \text{а 2-й: } \int_{-\infty}^{0} \end{matrix} \right\| =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2 i|\vec{r}-\vec{r}'|}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\varkappa\,\varkappa}{k^2-\varkappa^2}\,e^{i\varkappa|\vec{r}-\vec{r}'|} = \left\| \begin{matrix} \text{нужно взять контур по} \\ \text{комплексн. пл-ти} \Rightarrow \text{лемма} \\ \text{Жордана} \end{matrix} \right. \Rightarrow$$

два полюса: k и $-k$

$\Rightarrow$



= сдвинем полюса: что справа – вверх (в контуре) →
что слева – вниз (вне контура) →
→ если оба вне получим ноль. Сдвиг связан с при таком сдвиге мы получим сферич.-расходящ. волну.

сферически-расходящаяся

$$= \frac{i}{(2\pi)^2|\vec{r}-\vec{r}'|}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\varkappa\,\varkappa\, e^{i\varkappa|\vec{r}-\vec{r}'|}}{(\varkappa-k-i0)(\varkappa+k+i0)} = G^{+}(\vec{r}-\vec{r}')$$

$$G^{+}(\vec{r}-\vec{r}') = -\frac{\cancel{\varkappa}\, e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{2\pi|\vec{r}-\vec{r}'|\,2\cancel{\varkappa}}$$

$$\boxed{G^{+}(\vec{r}-\vec{r}') = -\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|}}$$

Нужно убедиться, что G^{+} содержит сферич.-расх. волну. Ищем асимптотику при $r\to\infty \Rightarrow$ должны найти $|\vec{r}-\vec{r}'|$

$V(\vec{r}')$ – имеет конечн. радиус действия → $\vec{r}'$ – величина огран-я

$$|\vec{r}-\vec{r}'| = \sqrt{r^2+r'^2-2\vec{r}\vec{r}'} = r\sqrt{1-\frac{2\vec{r}\vec{r}'}{r^2}+\frac{r'^2}{r^2}} \sim r\left(1-\frac{\vec{r}\vec{r}'}{r^2}+\ldots\right)$$

Подставим и посмотрим, что будет с G^{+} при $r\to\infty$:

$$G^{(+)}(\vec{r}-\vec{r}') \sim -\frac{e^{ikr - ik\frac{\vec{r}\vec{r}'}{r}}}{4\pi r} \sim \left\| \frac{k\vec{r}}{r} = \vec{k}' \text{ – волновой вектор рассеяной частицы} \right\| =$$

$$= -\frac{e^{ikr-i\vec{k}'\vec{r}'}}{4\pi r}$$

сф.-расх.

Нас интересует $\Psi^{(1)}(\vec{r})$ при больших $\vec{r}$:

$$\Psi^{(1)}(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2}\int d^3\vec{r}'\, G^{+}(\vec{r}-\vec{r}')\, V(\vec{r}')\, e^{i\vec{k}\vec{r}'} \Rightarrow \text{подставим } G^{+}(\vec{r}-\vec{r}') \Rightarrow$$

амплитуда рассеян.

$$\Psi^{(1)}(\vec{r}) \sim -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\,\frac{e^{ikr}}{r}\int d^3r'\, e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}'}\, V(\vec{r}')$$

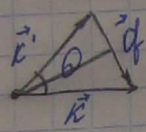
при $r\to\infty$ $\Psi(\vec{r}) \sim e^{i\vec{k}\vec{r}} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}$

Введем $q = k - k'$ - **передаваемый импульс**

для точечного заряда

$$\boxed{f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3r\, e^{i\vec{q}\vec{r}}\, U(\vec{r})}$$ – формула Борна (для упруг. рассеян.)

- в случае <u>упругого</u> рассеяния: $|\vec{k}| = |\vec{k}'| = k$



θ - угол рассеян. ; изменилось направл. импульса

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

Обычно имеем дело с пот. энергией, которая сферически-симм-на:

$$U(\vec{r}) = U(r)$$

Это значит, что можем интегрировать по углам:

$$\boxed{f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int\limits_0^\infty dr\, r \sin qr\, U(r)}$$ – формула Борна для центрально-симметр-го поля

Условие применимости ф. Борна:

Мы пользуемся теорией возмущ., а это значит, что каждый последующий член должен быть меньше пред-идущего по модулю:

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

плоская

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

рассм. исп, для которого $U(\vec{r}) = U(r)$ → интегрирование по углам:

$$\frac{m}{2\pi\hbar^2}\,\frac{2\pi}{k}\left|\int\limits_0^\infty dr'\, U(\vec{r}')\left[e^{2ikr'} - 1\right]\right| \ll 1$$

Рассм. 2 случая: **медленных и быстрых частиц.**

Обычно: $U(\vec{r}') \neq 0$, $\vec{r}' \ll d$, d - радиус потенциа

- медленные частицы: $kd \ll 1$, $e^{2ikr'} \sim 1 + 2ikr' + \ldots$

$$\tilde{U} = \frac{2}{d^2}\left|\int\limits_0^\infty dr\, r\, U(r)\right|$$

имеет разм-ть энергии

$$\frac{m\tilde{U}d^2}{\hbar^2} \ll 1$$ $$\boxed{\tilde{U} \ll \frac{\hbar^2}{md^2}}$$ – условие применимости для **медленных** частиц

$\tilde{E} = \dfrac{\hbar^2}{2md^2}$ – энергия необходимая для локализации частицы в области с линейными размера равными d

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

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

↙ условия прим-ии для быстрых частиц

$$\frac{m\bar{U}d}{\hbar^2 k}\cdot\frac{d}{d} \ll 1 \rightarrow \boxed{\bar{U} \ll \frac{\hbar^2}{md^2}kd}\ , \ \bar{U} \ll \tilde{E}kd$$

более жесткое условие для медленных частиц. → если борн-е приближ. применимо для медлен-х частиц, то для быстрых тем более. А вот если применимо для быстрых, то не факт, что - для медл-х.

$$\boxed{F(\vec{q}) = \frac{f(\vec{q})}{f(0)}}$$ - форм-фактор

§ 13 Рассеяние медленных частиц

с 363

24. 10. 2012

У нас ничего нет кроме ур-я Шр-га. Будем исходить из него.

У нас медленные частицы: $kd \ll 1$, где d - радиус действия потенциала.

Предполагаем, что потенц. сферически-сим. → угловая часть отделяется и получаем ур-е для радиальной части. Поле центрально-сим. ↳ будет центробежная энергия.

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

- рассмотрим область $d \ll r \ll 1/k$
  при $r \gg d$ потенц. энергией можно пренебречь,
  т.к. $r \ll 1/k$ можно пренебречь членами*

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

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

уравнение свободного движения (уже решали):

$R_{kl}(r) = C_1 r^l + C_2 r^{-l-1}$; C_1, C_2 - от энергии и от k не зависят

- рассмотрим: $r \gtrsim \sqrt{l(l+1)}/k$, становится сущ. член k^2!

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

решение - сферические функции Бесселя и Неймана

$$R_{kl}(r) = \underset{\downarrow}{A_1}\, j_l(kr) + A_2\, \underset{\downarrow}{n_l}(kr)$$

регулярное

Эти решения должны переходить одно в другое сшиваем: нужно взять ассимптотики ф. Неймана и Бесселя при малых знач. аргумента:

$$j_l(kr) \approx \frac{(kr)^l}{(2l+1)!!}$$ - ас-ка Бесселя

$$n_l(kr) \approx -\frac{(2l-1)!!}{(kr)^{l+1}}$$ - ас-ка Неймана

Чтобы переходило одно в другое:

$$A_1 = \frac{(2l+1)!!}{k^l} C_1 \ ; \quad A_2 = -\frac{k^{l+1}}{(2l-1)!!} C_2$$

Чтобы найти амплитуду рассеян. - коэф. при сферич. расх. волне. Вспомним ассимптотику (при больших знач аргумент

$$j_l(kr) \approx \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2})}{kr} \ , \quad n_l(kr) \approx -\frac{\cos(kr - \frac{l\pi}{2})}{kr}$$

Найдем ассимпт. волновой ф. для $kr \gg 1$. Подставляем:

$$R_{kl}(r) = \frac{(2l+1)!!C_1}{k^{l+1} r} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) + \frac{k^l C_2}{(2l-1)!! r} \cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) \Rightarrow$$ преобразуем

$$R_{kl}(r) = \frac{(2l+1)!!C_1}{k^{l+1} r} \left\{ \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) + \underbrace{\frac{k^{2l+1}}{(2l+1)!!(2l-1)!!} \frac{C_2}{C_1}}_{\star} \cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) \right\}$$

Переобозначим ★: $tg\, \delta_l = \frac{k^{2l+1} C_2}{(2l+1)!!(2l-1)!!C_1}$

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

$$= \frac{(2l+1)!!C_1}{k^l \cos\delta_l} \ \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l)}{kr}$$

δ_l - по смыслу можно считать фазой рассеяния туда входит k, а k - малая величина и мы можем $tg\,\delta_l$ заменить на δ_l. И мы можем записать зависимость от энергии

$$\boxed{\delta_l \sim k^{2l+1}}$$ - фаза медлен-х частиц

δ_0 - будет самая большая, а все остальные оч. маленьк

Вспомним нормальную амплитуду: $f_l = \frac{1}{2ik}\left(e^{2i\delta_l} - 1\right)$

фаза мала $\Rightarrow$ $f_l \approx \frac{\delta_l}{k} \sim k^{2l}$ → с хорошей точностью все фазы можно отбросить кроме δ_0

$$f(\theta) = f_0 = \frac{\delta_0}{k} = \frac{C_2}{C_1} = -a$$

a - длина рассеяния

Напишем диф. сечение: $\frac{d\sigma}{d\Omega} - |a|^2$ – не зависит от энергии и угла рассеяния.

интегр. сечение: $\sigma = 4\pi |a|^2$

§ 14 Рассеяние заряженных частиц кулоновским полем. (385

гипер-геом функц!

Решаем для непрерывного спектра. Решается точно, через гипер-геометрич. функции. Но мы решим в борновском приближении, решение совпадает с точным с точностью до фазового множителя.

кул. потенциал: ① $U(r) = \frac{\alpha}{r}$, $\alpha = \pm Z_1 Z_2 e^2$
если отталкивание/притяжение

В борн. прибл. ампл. рассеяния (центр.-сим. поле):

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

пот Юкавы

Вместо ① берем: $U(r) = \frac{\alpha}{r} e^{-\gamma r}$, $\gamma > 0$ => а потом устремим γ к нулю

Подставляем в ②:

$$f(\theta) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2 q} \int_0^\infty dr\, r \sin qr\, r e^{-\gamma r} = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2 q} \operatorname{Im} \int_0^\infty dr\, e^{-\gamma r + iqr} =$$

?

$$= -\frac{2m\alpha}{\hbar^2 q} \operatorname{Im} \left. \frac{e^{-\gamma r + iqr}}{-\gamma + iq} \right|_0^{*} = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2 q} \operatorname{Im} \frac{1}{\gamma - iq} = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2 q} \operatorname{Im} \frac{\gamma + iq}{\gamma^2 + q^2} = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2 (q^2 + \gamma^2)}$$

?

$$f(\theta) = \lim_{\gamma \to 0} \left(-\frac{2m\alpha}{\hbar^2 (\gamma^2 + q^2)} \right) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2 q^2} = \left\| q = 2k \sin\frac{\theta}{2} \right\| = -\frac{m\alpha}{2\hbar^2 k^2 \sin^2\frac{\theta}{2}} =$$

$$\left\| \hbar k = p = mv \right\| = -\frac{\alpha}{2mv^2} \frac{1}{\sin^2\theta/2}$$

Диф. сечение – это квадрат амплитуды:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \left(\frac{\alpha}{2mv^2}\right)^2 \frac{1}{\sin^4\frac{\theta}{2}}$$ – единственная формула, которая совпадает в клас. и кв. механике

w!

=> $\left[\frac{\alpha}{mv^2}\right] = \frac{e^2}{mv^2}$ – размерность длины, а она не содержит постоянную Планка.

$mv^2 = 2E$ → можем переписать.

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

Величина $\frac{\alpha}{\hbar v}$ – безразмерная величина $= n$ – кулоновский парам-р – парам-р Зоммерфельда

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

Амплитуда кул. рассеяния с правильным фазовым множителем - по абс. величине = 1.

$$f_{\text{кул.}}(\theta) = -\frac{\alpha}{2mv^2}\,\frac{\Gamma(1+in)}{\Gamma(1-in)}\,\frac{\exp(-2in\ln\sin\frac{\theta}{2})}{\sin^2\frac{\theta}{2}}$$

Мы решали задачу для точечных зарядов.

Рассмотрим рассеяние быстрых (энергия большая → можно пользоваться борновским приближением) электронов на атомах. (вклад неточечных зарядов):

Если есть простр. распредел. заряда нужно найти потенц. Кулона:

$$U(\vec r) = e\varphi(\vec r)$$ определ. из ур-я Пуассона

$$\Delta\varphi(\vec r) = 4\pi\rho(\vec r)$$ плотность распред. зарядов в атоме

Введем преобраз. Фурье для потенциала:

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

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

И тоже для плотности:

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

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

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

$$\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3q\,e^{-i\vec q\vec r}\left[\varphi(\vec q) - 4\pi\rho(\vec q)\right] = 0$$

$$\varphi(\vec q) = \frac{4\pi}{q^2}\rho(\vec q) = \frac{4\pi}{q^2}\int d^3r\,\rho(\vec r)\,e^{i\vec q\vec r} = \Big\|\text{нужно конкретно написать } \rho(\vec r)\Big\|$$

плотность распр. электронов; ядро считаем точечным

$$\rho(\vec r) = -en(\vec r) + Ze\,\delta(\vec r) \quad ; \quad \int d^3r\,n(\vec r) = Z$$ - зарядовый номер

$$\varphi(\vec q) = \frac{4\pi e}{q^2}\left[Z - F(\vec q)\right], \quad F(\vec q) = \int d^3r\,n(\vec r)\,e^{i\vec q\vec r}$$

$F(\vec q)$ - **атомный формфактор** - характеризует распределение электронов в атоме.

формула Борна:

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

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

$$f(\vec q) = -\frac{4\pi me^2}{2\pi\hbar^2q^2}\left[Z - F(\vec q)\right] = -\frac{2me^2}{\hbar^2q^2}\left[Z - F(\vec q)\right], \quad q = 2k\sin\frac{\theta}{2}$$

$$f(q) = -\frac{me^2}{2\hbar^2k^2\sin^2\frac{\theta}{2}}\left[Z - F(q)\right]$$

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

вспомним, что тако формфакт- интеграл Фурье, который зависит от плотности

$$F(q)=\int d^3r\, n(\vec r)\, e^{i\vec q\vec r}, \quad F(0)=Z$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\left(\frac{e^2Z}{2mv^2}\right)^2\frac{\left[1-\frac{F(q)}{Z}\right]^2}{\sin^4\theta/2}, \quad n(\vec r)\equiv n(r)$$

множитель, который отличает от формулы Резерфорда.

Рассмотрим несколько случаев:

① рассеяние на малые углы:

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

малые углы: $qa_0\ll1$, a_0 - радиус 1й боровской орбиты

$$a_0=\frac{\hbar^2}{me^2}$$

если углы малые $F(q)$ можно разложить в ряд:
(exp разложим до членов квадратичн. по r)

$$F(q)=\int d^3r\, n(r)\left[1+i\vec q\vec r-\frac{(\vec q\vec r)^2}{2}\right]=$$

интегрируем по углам (там где $d\Omega$: 1 даст 4π)

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

1й интеграл легко вычисляется: $\int d^3r\, n(r)=Z$
в задаче нет выделенного направления:

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

$$2\pi\int_0^\pi d\theta\sin\theta\cos^2\theta=\left\{\begin{matrix}\cos\theta=t\\-\sin\theta\, d\theta=dt\end{matrix};\ t\Big|_1^{-1}\right\}=2\pi\frac{2}{3}=\frac{4\pi}{3}$$

$$\int d^3r\, n(r)\frac{(\vec q\vec r)^2}{2}=\frac{q^2}{6}4\pi\int_0^\infty dr\, r^4\, n(r)=\left\{\begin{matrix}\text{подынтегр. выраж. от}\\\text{углов не зависит}\end{matrix}\right. \rightarrow$$

заменим 4π на инт. по $d\Omega$

$$=\frac{q^2}{6}\underbrace{\int d^3r\, r^2 n(r)}_{Z\langle r^2\rangle}=\frac{Zq^2\langle r^2\rangle}{6}$$

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

Напишем амплитуду рассеяния:

$$f(\theta)=-\frac{2me^2}{\hbar^2q^2}\left[Z-F(q)\right]=-\frac{\cancel{2}me^2Z\cancel{q^2}\langle r^2\rangle}{\hbar^2\cancel{q^2}\cancel{6}_3}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\left(\frac{Zme^2\langle r^2\rangle}{3\hbar^2}\right)^2$$ - для малых углов не зависит от угла рассеян. и определ. среднеквадр. радиусом атома

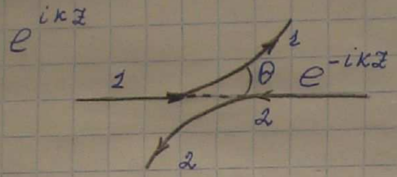
② для больших углов $qa_0 \gg 1$

exp быстроосциллирующая, роль формфактора ничтожна - можем пренебречь → возвращаемся к формуле Резерфорда.

§ 15 Столкновения тождественных частиц

Если рассеив. друг на друге тожд.е частицы, то в системе центра масс возникает картинка:

обменное взаимод-е ?



тождественность частиц приводит к возникновению обменного взаимодействия м/у ними, т.к. одинак. частицы в этом случае нельзя различить.

В силу тождест-ти частиц в кв. мех. эти две „картинки" неразличимы.

Какой волновой ф. описывать?

Частица движ-ся с „$-\infty$": e^{ikz}

Частица движ-ся с „$+\infty$" e^{-ikz}

Нужно найти сечение - вероятность того, что какая-то частица вылетит в телесный угол. А амплитуда рассеян. - коэф. при сферич.-расх. волне.

Спиновая часть волновой функции:

$$\chi_{SM}(1,2) = \sum_{m_1, m_2} (sm_1\, sm_2 | SM)\, \chi_{sm_1} \chi_{sm_2}$$

коэф. Клебша-Гордана

Коэф. **К-Г** обладают св-вом:

$$(sm_1\, sm_2 | SM) = (-1)^{2s-S} (sm_2\, sm_1 | SM)$$

Напишем полную волновую функцию:

$$\Psi_{SM}(1,2) = \Psi_{SM}^{коорд.}(1,2)\, \chi_{SM}(1,2)$$

$$\Psi_{SM}(1,2) = (-1)^{2s} \Psi_{SM}(2,1)$$

если s - целое, то волновая ф. симметрична
s - полуцелое, то - антисимметрична

=> выполняется пр. Паули

$\chi_{SM}(1,2) = (-1)^{2s-S} \chi_{SM}(2,1)$ => можем запис. коорд. част

$\Psi_{SM}^{коорд.}(1,2) = (-1)^{S} \Psi_{SM}^{коорд.}(2,1)$ (кот. зависит от полного спи

Когда всё расм. в системе центра масс, то перестановка 2х частиц эквивалентна инверсии.

Инверсия: $r \to r$ $\qquad z = r\cos\theta \to -z$

$\theta \to \pi - \theta$

$\varphi \to \varphi + \pi$

Напишем ассимпт. волн. ф. на большом расст. от рассеивающего центра:

$$r \to \infty \quad \Psi(\vec{r}) \sim \underbrace{e^{ikz} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}}_{\text{для } 1^{й} \text{ част.}} \quad \text{(плоская волна + сф. расх.)} \quad \overset{\text{знак при инверсии}}{\pm} \underbrace{\left[e^{-ikz} + f(\pi-\theta)\frac{e^{ikr}}{r}\right]}_{\text{для } 2^{й} \text{ част.}}$$

Для сечения два случая:

- если суммарный спин - четный:

$$d\sigma_s = |f(\theta) + f(\pi-\theta)|^2 d\Omega$$

- если суммарный спин - нечетный:

$$d\sigma_a = |f(\theta) - f(\pi-\theta)|^2 d\Omega$$

Знаем ампл. рассеян. для медленных частиц: $f(\theta) = -a$

Вычислим $d\sigma_s$ и $d\sigma_a$ в этом случае:

$$d\sigma_s^{(0)} = 4|a|^2 d\Omega \quad \leftarrow \text{для медл. частиц}$$

$$d\sigma_a^{(0)} = 0$$

Если выраж в [ ] возвести по | | в квадрат:

$$d\sigma_s = \left[|f(\theta)|^2 + |f(\pi-\theta)|^2 + 2\,\mathrm{Re}\, f(\theta) f^*(\pi-\theta)\right] d\Omega$$

$$d\sigma_a = \left[|f(\theta)|^2 + |f(\pi-\theta)|^2 - 2\,\mathrm{Re}\, f(\theta) f^*(\pi-\theta)\right] d\Omega$$

появл. интерференцион-е члены, кот. в классической механике нет:

$$d\sigma_{кл} = \left[|f(\theta)|^2 + |f(\pi-\theta)|^2\right] d\Omega$$

Если частицы не нах-ся в определ. спиновом состоянии (пучок и мишень не поляризованы) нужно провести усреднение по спинам.

Для 2х частиц $(2S+1)^2$ разных спиновых состояний

- если S - целое (бозон) [четное], то спиновых состояний с $\overset{\text{как спин}}{S}$ будут
  - S - четное $\quad (S+1)(2S+1)$
  - S - нечетное $\quad S(2S+1)$
- а если S - полуцелое, то наоборот
  - S - четн. $\quad S(2S+1)$
  - S - нечетн. $\quad (S+1)(2S+1)$

Статистические веса:

1. Бозоны - частицы с целым спином

$$\overset{\text{четн.}}{w_e^B} = \frac{S+1}{2S+1}, \quad \overset{\text{нечетн.}}{w_o^B} = \frac{S}{2S+1}$$

$$d\sigma_B = w_e^B d\sigma_s + w_o^B d\sigma_a = \left[|f(\theta)|^2 + |f(\pi-\theta)|^2 + \frac{2}{2S+1} \mathrm{Re}\, f(\theta) f^*(\pi-\theta) \right] d$$

разница $\Rightarrow \frac{2}{2S+1}$

2 Фермионы - частицы с полуцелым спином

$$w_e^F = \frac{S}{2S+1}, \quad w_o^F = \frac{S+1}{2S+1}$$

$$d\sigma_F = w_e^F d\sigma_s + w_o^F d\sigma_a = \left[|f(\theta)|^2 + |f(\pi-\theta)|^2 - \frac{2}{2S+1} \mathrm{Re}\, f(\theta) f^*(\pi-\theta) \right] d\Omega$$

разница $\Rightarrow -\frac{2}{2S+1}$

Рассм. примеры:

1. бозон: α част. на α част. и 2. фермион: $p \to p$

Сделаем предпол., что у нас чисто кулоновское рассеяние (нет ядерных сил)

$$f_{\text{кул.}}(\theta) = -\frac{\alpha}{mv^2} \frac{\Gamma(1+in)}{\Gamma(1-in)} \frac{\exp(-2in \ln \sin(\theta/2))}{\sin^2 \frac{\theta}{2}}$$

$n = \frac{\alpha}{\hbar v}$, $\alpha = Z_1 Z_2 e^2$ - знаки одинаковые → всегда отта

① α-α : $\alpha = 4e^2$, $n = \frac{4e^2}{\hbar v}$ спин α част. $= 0$!

$$\frac{d\sigma_{\alpha\alpha}}{d\Omega} = \left(\frac{2e^2}{\underset{\substack{\uparrow \\ \text{приведенная} \\ \text{масса}}}{m} v^2}\right)^2 \left[\frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} + \frac{1}{\cos^4 \frac{\theta}{2}} + \frac{2\cos\left(2n \ln \mathrm{tg} \frac{\theta}{2}\right)}{\sin^2 \frac{\theta}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2}} \right] \qquad m = \frac{m_\alpha}{2}$$

② p-p: $\alpha = e^2$, $n = \frac{e^2}{\hbar v}$ спин $p = 1/2$!

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

Рассм. медленные частицы: $e^2 \gg \hbar v$, $n \gg 1 \Rightarrow$ аргум. cos быстро осцил. величина → отбрас
→ интерфер. члены уходят → получаем формулу классич. мех-ки

Рассм. быстрые частицы: $e^2 \ll \hbar v$

$$\frac{d\sigma_{\alpha\alpha}}{d\Omega} = \left(\frac{8e^2}{mv^2}\right)^2 \frac{1}{\sin^4\theta}, \qquad \frac{d\sigma_{pp}}{d\Omega} = \left(\frac{e^2}{}\right)^2 \frac{1+3\cos^2\theta}{}$$

§ 16 Упругое рассеяние при наличии неупругих процессов

С 352

Неупругое рассеяние – возбуждение внутренних степеней свободы (часть энергии уходит на возбуждение)

Удобно использовать схему: частица a сталкивается с част. A и может быть несколько процессов

Входной канал

a + A initial

Выходной канал

направл. движения, скорость, импульс

$a + A$ упругое рассеяние (кинематич. парам-ры меняются)

$a + A^{**}$ возб. состояние неупругое

$b + B$ реакция

final

$c + C + D$ более сложная реакция

......

$z + Z$

Когда много выходных каналов должна быть Σ выходных каналов.

Мы писали асимпт-ку волн. ф. при $r \to \infty$:

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

Рассм. случай, когда было возможно только упругое рассеяние (открыт упругий канал) и $|S_l| = 1$, а если открыт хотя бы 1 неупругий канал $|S_l| < 1$ → комплексная фаза

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

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

σ_e?

σ_l?

Как найти сечение?

диф-е: $\frac{d\sigma_l}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$ интегр-е: $\sigma_l = \int d\Omega\, |f(\theta)|^2$

Нужно воспольз-ся условием ортонормированности полиномов Лежандра:

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

Ампл. рассеян. от φ не зависит $\Rightarrow \int d\varphi = 2\pi$

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

$$\boxed{\sigma_e = \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)|1-S_l|^2}$$ – интегр. сечение упругого рассеяния

Перепишем в другой форме.

матричн. элем S_l диаг. что диагонален => когда переходим к каналам, нужно писать индексы каналов: E, S

В упруг. рассеян. вх. и вых. каналы одинаковы

$$S_l \to S_{ii}^{(l)}$$

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

Переходы в системе: $\Psi_f - \Psi_i = (\hat{S}-1)\Psi_i$

теперь можем учесть такое соотношение:

$$\langle f|\hat{S}-1|i\rangle = S_{fi} - \delta_{fi}$$

Если хотим написать по аналогии с сечением рассеян. сечение реакции по индексам каналов.

делаем замену: $1 - S_{ii}^{(l)} \to \delta_{fi} - S_{fi}^{(l)}$

$$\sigma_{fi} = \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left|\delta_{fi} - S_{fi}^{(l)}\right|^2$$

Удобно пользоваться **сечением реакции**:

$$\sigma_r = \sum_{f\neq i}\sigma_{fi} = \frac{\pi}{k^2}\sum_{f\neq i}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left|S_{fi}^{(l)}\right|^2$$

Оператор рассеяния **унитарный**: $\hat{S}^+\hat{S} = 1$

в матричн. виде: $\sum_f \left|S_{fi}^{(l)}\right|^2 = 1$

$$\sum_{f\neq i}\left|S_{fi}^{(l)}\right|^2 = 1 - \left|S_{ii}^{(l)}\right|^2$$

Получаем:

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

Сечение реакции выраж-ся через тот же диаг. матричн. элем., что и упругое рассеяние => можем вернуться к старым обозначениям

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

Видим, что $\sigma_r \neq 0$, $|S_l| < 1$

Любой неупругий процесс сопровождается **ВСЕГДА** упругим рассеянием, а упругое НЕ обяз. -неупругим

$|S_l| = 1$ – упругих процессов нет.

$|S_l| = 0$

Мы получ. выраж-я для σ_e и σ_r, если их сложить:

$$\underset{\text{полное сечение}}{\longrightarrow} \sigma_{total} = \sigma_e + \sigma_r = \frac{2\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(1-\mathrm{Re}\,S_l)$$

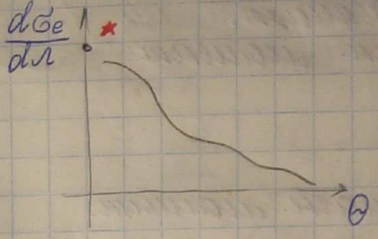
Вспомним формулу Факсена-Хольтсмарка:

$$f(\theta) = \frac{i}{2k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(1-S_l)P_l(\cos\theta)$$ -> нулевой угол $\theta = 0$

$$\mathrm{Im}\, f(0) = \frac{1}{2k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(1-\mathrm{Re}\,S_l)$$

$$\boxed{\sigma_t = \frac{4\pi}{k}\,\mathrm{Im}\, f(0)}$$ - оптическая теорема (Бора-Пайерлса-Плачека) ?

Экспер-но проверить нельзя, т. к. частицу рассеянную на нулевой угол не отличить от частиц изначально вылетевших.



Измер. полное сечение

*оптическая точка - нах-ся по оптической теореме

Нам нужно рассмотреть

Если частицы медлен-е, основной вклад дают состояния $l = 0$ =>

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

фаза δ_0 - оч. маленька, т. к $\delta_0 \sim k$, а для медл-х частиц $k \to 0$ => можем разложить exp

$$\approx 1 + 2i\delta_0 = 1 - 2ika$$

a - длина рассеяния

упр. канал открыт → a - действ. величина, т. к. δ_0 - действ.

упр. + неупр. канал → a - мнимая (комплексн.) величина

$$a = a_1 + ia_2$$

Но $|S_0| \leq 1$, в силу унитарности. Это наклад-ет ограничение на a:

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

$$\sqrt{(1+2ka_2) + 4k^2a_1^2} \leq 1 \Rightarrow a_2 < 0$$ ↙ должно быть, чтобы матр. рассеяния была унитарной

Сечение упругого рассеяния: $\boxed{\sigma_e = 4\pi|a|^2}$

$$\sigma_r = \frac{\pi}{k^2}\left[1 - |S_0|^2\right] = \frac{\pi}{k^2}\left[1 - |1 - 2ika_1 + 2ka_2|^2\right] = \frac{\pi}{k^2}\left[1 - 1 - 4ka_2\right] =$$

закон „1/v“

$$= \left\| \text{оставляем члены квадратичные по } a,\ a_2 < 0 \right\| = \frac{4\pi}{k}|a_2| \qquad \boxed{\sigma_r = \frac{4\pi}{k}|a_2|}$$

↪ скорость, $\hbar k = p = mv$

Глава -3- Движение в магнитном поле

§ 17 Ур-е Шредингера в магн. поле

Нужно напис. клас. ф. Гамильтона и перейти к операторам:

$$H = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + e\varphi$$ (при наличии векторного и скалярного потенциала)

добавка

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

В клас. физике нет понятие спина частицы. Если у част. $S \neq 0$ у нее есть магн. дип. момент

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

Если выберем ось квант-я и спроектир. магн. момент:

$$\mu_z = \mu\frac{\sigma}{S}$$, μ – max знач. проекц. магн. мом. на ось кв-я

Магнетон Бора: $$\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m_e c} = 0,579\cdot10^{-8}\,\frac{эВ}{Гс}$$

$$\mu_e = -\mu_B$$

Перейдем к $p^м$ и $n^м$ => $S = 1/2$ => должны быть магн. мом

Введем: $$\mu_N = \frac{|e|\hbar}{2m_p c} = 0,315\cdot10^{-11}\,\frac{эВ}{Гс}$$

ядерный магнетон

Эксперимент дает: $\mu_p = 2,79\,\mu_N$, $\mu_n = -1,91\,\mu_N$

Оператор $\hat{\vec{p}}$ не коммутир. с векторным потенциалом $\hat{\vec{A}}$ если хотим раскрыть скобки:

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

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla,\quad \vec{A}\hat{\vec{p}} - \hat{\vec{p}}\vec{A} = i\hbar\,\mathrm{div}\vec{A}$$

если $\mathrm{div}\,\vec{A} = 0$, то $\vec{A}$ и $\hat{\vec{p}}$ - коммутир.

Запишем ур-е Шр-ра для e:

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

ур-е Паули

§ 18 Движение заряженной частицы в однородном магн. поле

21.11.2012г

Нам нужно найти энергию.

Скалярн. потенциал = 0.

1930г - Ландау впервые решил эту задачу

Должны выбрать опред. образом векторный потенциал.

$A_x = -yH$

$A_y = A_z = 0$. Магн. поле направл. вдоль оси Z (из $\operatorname{rot}\vec{A} = \vec{H}$)

Теперь можем напис. гамильтониан для дан. задачи: (полагаем, что заряж. частица e^- - позже)

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

$\hat{S}_z$ коммутир. с $\hat{H}$ т.к. $\hat{H}$ не содержит проекции спина на другие оси. Когда $\hat{H}$ подействует на волн. ф. $S_z \to \sigma$:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left[\left(\hat{p}_x + \frac{eH}{c}y\right)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right] - \frac{\mu\sigma H}{s}\Big\}\Psi(\vec{r})$$

Тогда ур-е Шр-ра:

$$\left\{\frac{1}{2m}\left[\left(\hat{p}_x + \frac{eH}{c}y\right)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right] - \frac{\mu\sigma H}{s}\right\}\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$$

В каком виде искать решение? Гам-н не содержит явно x и z, X и Z не ком. → $\hat{p}_x$ и $\hat{p}_z$ коммут. с $\hat{H}$ ⇒ x и z компонента обобщ. импульса сохр-ся → по x и z - плоские волны

$$\Psi(\vec{r}) = e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_z z)}\mathcal{X}(y)$$

Перейдём к одномерному движению.

$A_z = 0$ → z-сост. обобщ. импульса совпадает с соотв. составляющей обычного импульса: $p_z = m v_z$ → скорость вдоль оси z может иметь произв. значение → энергия вдоль поля не квантуется (кв-ся в направл. ⊥-ом магн. полю)

Нужно напис. ур-е для $\mathcal{X}(y)$:

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

$$\mathcal{X}''(y) + \frac{2m}{\hbar^2}\left[\left(E + \frac{\mu\sigma H}{s} - \frac{p_z^2}{2m}\right) - \frac{m}{2}\omega_H^2(y-y_0)^2\right]\mathcal{X}(y) = 0$$

$\omega_H = \frac{|e|H}{mc}$ - циклотронная частота

$y_0 = -\frac{cp_x}{eH}$

Можем переписать наше ур-е:

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

$$\mathcal{E} = E + \frac{\mu \sigma H}{S} - \frac{p_z^2}{2m}$$ – имеет смысл энергии

Свели к задаче о гарм. осциллятора. И решение мы знае

$$\mathcal{E}_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_H$$

$$\boxed{E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_H - \frac{\mu\sigma H}{S} + \frac{p_z^2}{2m}}$$

→ уровни энергии, вырождены по p_z с ∞-кратностью.

$-\infty < p_x < +\infty$

$-\infty < p_z < +\infty$

1й член дает дискретные значения → определяют дискретны уровни - уровни Ландау.

Перейдем к электрону:

Магн. момент: $\mu_e = -\frac{|e|\hbar}{2mc} = -\mu_B$

$S = 1/2$

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

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

Для e^- есть дополнительная вырождение связанное с:

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

$(n+1, \sigma = -\frac{1}{2})$ ⇒ одинак. уровни

Вспомним о

Клас. мех.: движ. в пл-ти x, y происх. по окр-ти, с неподвижн. центром.

В кв. мех: y_0 должна соотв. коорд. x

$$x_0 = \frac{cp_y}{eH} + x$$

§ 19 Атом в магнитном поле

С 270

ΔE-?

Под действием внешнего одн(ор). маг. поля эн. уровни атома расщепляются. Гамильт. атома, нах-ся в маг. поле:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\sum_{a=1}^{Z}\left[\vec{P}_a + \frac{|e|}{c}\vec{A}_a(\vec{r}_a)\right]^2 + \frac{|e|\hbar}{mc}\vec{H}\hat{\vec{S}} + \hat{U}$$

$$\frac{1}{S}\sum_a \hat{\vec{S}}_a = \frac{s}{S}\hat{\vec{S}}$$

Как выбрать векторный потенциал? (удобно, когда $\operatorname{div} A = 0$)

$$\vec{A}_a(\vec{r}_a) = \frac{1}{2}[\vec{H}, \vec{r}_a]$$ (div этого выраж. $=0$

$$\frac{1}{2m}\sum_a \hat{\vec{P}}_a^2 + \hat{U} = \hat{H}_0$$ - это часть гам-на, кот. не зависит от маг. поля.

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

т.к. $\hat{\vec{P}}_a\vec{A}_a = \vec{A}_a\vec{P}_a \rightarrow \sum_a \vec{P}_a[\vec{H}, \vec{r}_a] = \sum_a[\vec{H}, \vec{r}_a]\vec{P}_a =$

смеш. произв. 3х векторов - можно менять скобки

$$= \vec{H}\sum_a \underbrace{[\vec{r}_a, \vec{P}_a]}_{\hbar \hat{\vec{l}}_a} = \hbar\vec{H}\sum_a \hat{\vec{l}}_a = \hbar\vec{H}\hat{\vec{L}}$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{|e|\hbar}{2mc}\vec{H}(\hat{\vec{L}} + 2\hat{\vec{S}})^{①} + \frac{e^2}{8mc^2}\sum_a[\vec{H}, \vec{r}_a]^{2 ②}$$

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

$$\hat{\vec{\mu}}_{\text{ат}} = -\mu_B(\hat{\vec{J}} + \hat{\vec{S}}) \quad ; \quad \vec{H}(\hat{\vec{J}} + \hat{\vec{S}}) = \vec{H}(\hat{J}_z + \hat{S}_z)$$

маг. мом. атома не коллинеарен с $\hat{\vec{J}}$ - полный мом. имп.

?

1е эксперименты по расщеплению атома были проведены в слабых магнитных полях.

$\mu_B H \ll \overline{\Delta E}$ - эф. **Зеемана** - расщепление уровней, которые хар-ся J, L, S

Если поле слабое - можем воспользоваться теорией возмущений. Берем 1й член линейный по H. Ось z выбираем вдоль поля.

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

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

Ед. строго-сохр-ся величиной явл. полный момент.

Если хотим найти $\langle\hat{\vec{S}}\rangle \rightarrow C\langle\hat{\vec{J}}\rangle$. Нужно найти **С!**

$\langle \hat{S}_z \rangle = C \langle \hat{J}_z \rangle = C M_J$ Пока C - опред. не можем.

Но есть выражение $\langle \hat{\vec{S}} \hat{\vec{J}} \rangle = C \langle \hat{\vec{J}}^2 \rangle = C J(J+1)$

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}\ ,\quad \hat{\vec{L}} = \hat{\vec{J}} - \hat{\vec{S}}$$

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

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

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

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

!

$$^{I}\Delta E = \mu_B H M_J\, g\ ,\qquad g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

влияет на расщепл. уровней

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \mu_B(\hat{\vec{J}} + \hat{\vec{S}})\hat{H}\ ;\quad J = L + S$$

?

g → множитель Ланде
g → гиромагн. отношение (множитель)
g → g - фактор

if $S = 0$, $g = 1$ - нормальный эф. Зеемана
$g \neq 1$ - аномальный эф. Зеемана

if $L = 0$, $J = S$ → $g = 2$

Когда изуч. атом в эл. поле выяснили, что эл. поле полностью не снимает вырождение ($M_J = -M_J$), а маг. поле полностью снимает.

28.11.2012г

Возьмем : $^4D_{1/2}$ => $J = 1/2$; $S = 3/2$; $L = 2$ => $g = 0$ - 1я поправка буд
=> нужно искать 2ю поправку

а) если атом нах-ся в сост. с $L = 0$; $S = 0$, то в этом сост. все поправки члена ① будут $= 0$ => нужно вз поправку от квадратичного члена ②

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

θ - угол м/у $\vec{r}_a$ и направл маг. поля

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

$1 - \cos^2\theta$

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

$$^{II}\Delta E = \frac{e^2 H^2}{12mc^2}\sum_a \langle r_a^2 \rangle$$

Вспомним : когда изуч. алгебру матриц, получили фо матичный обычн. ур-е Шр-ра для дискретно спектра:

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

предполагаем, что $\hat{H}(\lambda) \to E_n(\lambda) \to \Psi_n(\lambda)$

продифф-ем по λ:

$$(\hat{H}-E_n)\frac{\partial\Psi_n}{\partial\lambda}=\left(\frac{\partial E_n}{\partial\lambda}-\frac{\partial\hat{H}}{\partial\lambda}\right)\Psi_n$$ => домножим слева на Ψ_n^* и проинт по всему конфиг. пр-ву

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

поработаем только с левой частью (вспомним трансп. оператор) $\tilde{\hat{H}}=\hat{H}^*$

$$\int dq\,\Psi_n^*(\hat{H}-E_n)\frac{\partial\Psi_n}{\partial\lambda}=\int dq\,\frac{\partial\Psi_n}{\partial\lambda}(\tilde{\hat{H}}-E_n)\Psi_n^*=\int dq\,\frac{\partial\Psi_n}{\partial\lambda}\left[(\hat{H}-E_n)\Psi_n\right]^*=0$$

докажем, что левая часть $=0$ => и правая $=0$.

$$\left(\frac{\partial\hat{H}}{\partial\lambda}\right)_{nn}=\frac{\partial E_n}{\partial\lambda}$$ – Th Хеллмана - Фейнмана

Магн. поле $\hat{H}$ - можно рассм. как параметр.
Мы писали в ур-е Шр. $-\mu_z H$ → можем записать:

$$\langle\hat{\mu}_z\rangle=-\frac{\partial(\Delta E)}{\partial H}$$

- для случая I $\langle\hat{\mu}_z\rangle=-\mu_B\,g\,M_J$
- для случая II $\langle\hat{\mu}_z\rangle=\chi H$ ← магнитн. восприимч.

$$\boxed{\chi=-\frac{e^2}{6mc^2}\sum_a\langle r_a^2\rangle}$$ - ф. Ланжевена

χ - отриц. => это вещ-во диамагнетик => диамагнитн. атом

б) Может быть случай: $J=0$; $L\neq0$; $S\neq0$
=> лин. по полю член не даст поправку, квадратичн. намного больше. Но мы знаем, что 2я попр. по теории возм. отрицательная: $\Delta E<0$, а $\langle\hat{\mu}_z\rangle>0$ => парамагнитн. атом

Все делали для слабого поля.

А можно рассм. в сильных полях:
=> расщ. уровней будет отлич. от тех, что предсказ. Зееман
→ эф. Пашена - Бака

- Грузин преподает в школе русский язык приходит на урок и говорит:
  - Дети, запишите: соль и фасоль пишется с „ь" знаком, а вилка и тарелка - без „ь" знака! Вы запишите, потому что понять это невозможно.
- Голос водителя автобуса: „Все зайцы козлы!"

Отдельно о Cu, Ag, Au

Cu – оболочка заполнена полностью => должна вести себя как элем. основн. группы

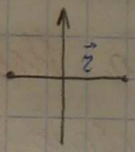
А на самом деле в соед-и: 3d → 4p

Ag – как эл. группы палладия

Au – к эл. группы платины

§22 Колебательная и вращательная структуры синглетных термов двухатомных молекул

Синглетные → $S = 0$



Должны рассм-ть · колебание ядер
· вращение ядер

2х ат. молекула не может вращ-ся вокруг оси симметрии → все сост. неразличимы, только вокруг оси ⊥ к оси симметри

Ядра атомов - тяжелые → движ-ся медленно

Пусть есть 2х ат. молекула. Полный орбит. момент всех e^- $\vec L$. Если молекула вращ-ся возникает момент вращения $\vec K$ – состоит из орбитального и вращательн

если $\hat{\vec K} - \hat{\vec L}$ – это момент вращения,

а если $B(r)(\hat{\vec K} - \hat{\vec L})^2$ – энергия вращения

Если взять твердотельную модель молекул:

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

μ – приведенная масса $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$

Нужно усреднить по электронному состоян. молекулы:

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

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

$$\langle \hat L_z \rangle = \Lambda$$

не может завис. от
только от Λ

$$U_K(r) = U(r) + B(r)K(K+1) - \underbrace{2B(r)\langle \hat{\vec K}\hat{\vec L} \rangle}_{\text{не завис. от } K} + B(r)\underbrace{\langle \hat{\vec L}^2 \rangle}_{\to \text{зависит только от эл.}}$$

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

$$= \langle \hat K_x \rangle \underset{=0}{\langle \hat L_x \rangle} + \langle \hat K_y \rangle \underset{=0}{\langle \hat L_y \rangle} + \langle \hat K_z \rangle \langle \hat L_z \rangle =$$

$$= \langle \hat K_z \rangle \Lambda$$

// каждый опер. должен усредн. независимо
// в представл., где $\hat L_z$ имеет значение → L_x, $L_y = 0$

т.к. молекула вращ-ся вокруг оси ⊥ оси симметрии =>

$(\hat{\vec{K}} - \hat{\vec{L}})\vec{n} = 0$, $\hat{\vec{K}}\vec{n} = \hat{\vec{L}}\vec{n}$

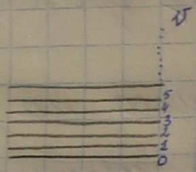
$\langle \hat{\vec{K}}\vec{n} \rangle = \langle \hat{\vec{L}}\vec{n} \rangle$, $\langle \hat{K}_z \rangle = \langle \hat{L}_z \rangle = \Lambda$

$$U_K(r) = U(r) + B(r)K(K+1)$$

видим, что $\langle \hat{K}_z \rangle = \Lambda \Rightarrow K \geq \Lambda$

Получили энергию → нужно подставить в ур-е Шр-ра и решать → → получим спектр уровней → можем его проанализировать.

$V = 0; 1; 2; \dots$



в общем виде спектр найти нельзя, но можно прибл-но для самых маленьких к и v

Все величины из выраж. для V разложим в ряд по величине:

$\xi = r - r_e$, r_e - значение, при кот. $U(r)$ имеет min

$U_e = U(r_e)$

ω_e - частота колеб. ядер

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

$B(r) = B_e + \dots + B_e = B(r_e)$

$$U_K(r) = U_e + B_e K(K+1) + \frac{\mu\omega_e^2}{2}\xi^2$$

Задача сводится к задаче в осцил-ре

Вернемся к $B_e = \frac{\hbar^2}{2\mu r_e^2} = \frac{\hbar^2}{2I_e}$, $I_e = \mu r_e^2$ - момент инерции молекулы.

Если подставим в ур-е Шр-ра:

$$E = \underbrace{U_e}_{\text{электронная}} + \underbrace{B_e K(K+1)}_{\text{вращательная}} + \underbrace{\hbar\omega_e\left(V + \frac{1}{2}\right)}_{\text{колебательная}}$$

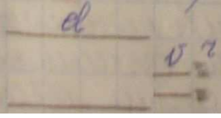
$E = E_{el} + E_r + E_v$

Нужно оценить величину каждой из энергий. Нужна величина по которой будем градуировать:

$\frac{m_{яд.}}{m_{эл}} \gg 1$; $\frac{m_{эл}}{m_{яд.}} \ll 1$

- Эл. энергия не может зависеть от масс ядер.
- Вращ. энергия $B_e \sim \frac{1}{\mu}$
- Колебат энергия $(\omega = \sqrt{\frac{K}{\mu}})$ $\omega_e \sim \frac{1}{\sqrt{\mu}}$

$\Delta E_{el} \gg \Delta E_v \gg \Delta E_r$



12.12. 2012г.

§ 23 Мультиплетные термы (294

Спин молекулы ≠ 0

Если мы в нулевом прибл. отбросим влияние спина на уровни - уровни вырождены (2S+1). Не учитыв. релятивист. эффекты.

Релят. эф. в молекуле - взаимодействие спин-ось. Больший вклад спин-орбит. взаимод.

Много случаев, но рассмотрим два.

23(а

Случай а) взаимод. спин-ось велико по сравнению с характерным расстоянием м/у вращательными уровнями. $E_{сп-ось} \gg \Delta E_r$

Есть спин. Сохр-ся величина: проекция спина на ось симметрии молекулы $\Sigma = S, S-1, \dots, -S$
Будем считать Σ «+», если направл. спина совпадает с направл. проекции Λ орбитального момента молекулы на ось z.

Если $\Lambda + \Sigma = \Omega$ - проекция полного мом.

$\Omega = \Lambda+\Sigma, \Lambda+\Sigma-1, \dots, \Lambda-\Sigma$

Ω - пишут справа внизу: $^2\Pi_{1/2}$

Учет движения ядер приводит к колебаниям и вращениям

В случае а) кв. числа ~~K~~ - не сущ. Есть полный момент J

$J = |\Omega|; |\Omega|+1; \dots$

Вспомним атом: усредним оператор спин-орбитального взаимодействия. По аналогии усреднение:

$$\overset{\text{энергия неусред. терма}}{U(r)} + \underbrace{A(r)}_{\text{зависимость от } \Lambda \text{ уже в } A}\Sigma \quad \text{функц. расст. } r \text{, которая зависит от первонач. терма}$$

Перейдем к проекции полного момента:

$$U(r) + A(r)\Sigma + A(r)\Lambda - A(r)\Lambda \to U(r) + A(r)\Omega$$

Докажем, что $A(r) = 0$ для Σ-терма.

Δ $U(r) + A(r)\Omega$ => изменим знак времени: $t \to -t$
(все моменты и проекции моментов меняют знак)
$\vec{M} = [\vec{r}, \vec{p}]$

для Σ термов $\Lambda = 0$: при замене $t \to -t$ =>
$A(r)$ и $U(r)$ могут зависеть только от Λ,
а Λ мене

=> энергия терма не измен., а знач. проекций орбит. мом. и спина на ось z измен. на противоположный => проекц. полного мом. меняет знак => $A(r)$ должна изменить знак.
Если $\Lambda = 0$ (Σ-терм), но $A(r)$ не может меняться => должна обращ. в ноль ▲

т. к $A(r)$ обращается в „0" обычно имеет место случай (в

Займемся усреднением. Должны учесть вращение.

Момент вращение: $(\hat{\vec{J}} - \hat{\vec{L}} - \hat{\vec{S}})^2 B(r)$ оператор

энергия не может завис. от вектора

Усреднить по эл. терму и сложить с энергией => получим энергию расщепл. молекулярного терма.

$$U_J(r) = U(r) + A(r)\Omega + B(r)\langle(\hat{\vec{J}} - \hat{\vec{L}} - \hat{\vec{S}})^2\rangle =$$

$$= U(r) + A(r)\Omega + B(r)\left[\langle\hat{\vec{J}}^2\rangle - 2\langle\hat{\vec{J}}(\hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}})\rangle + \underbrace{\langle\hat{\vec{L}}^2\rangle} + 2\underbrace{\langle\hat{\vec{L}}\hat{\vec{S}}\rangle} + \langle\hat{\vec{S}}^2\rangle\right]$$

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

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

$\langle\hat{\vec{L}}^2\rangle$ - не зависит от спина - включаем в $U(r)$

$(\hat{\vec{J}} - \hat{\vec{L}} - \hat{\vec{S}})\vec{n} = 0$

$\vec{n}$ → ось симметрии

$\hat{\vec{J}}\vec{n} = (\hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}})\vec{n}$

$\langle\hat{\vec{L}}\vec{n}\rangle = \Lambda$; $\langle(\hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}})\vec{n}\rangle = \Omega \Rightarrow \langle\hat{\vec{J}}\vec{n}\rangle = \Omega$

$\langle\hat{\vec{S}}n\rangle = \Sigma$

$\langle\hat{\vec{J}}(\hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}})\rangle = \langle\hat{\vec{J}}\rangle\langle\hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}\rangle = \Omega^2$

$\langle\hat{\vec{L}}\hat{\vec{S}}\rangle = \langle\hat{\vec{L}}\rangle\langle\hat{\vec{S}}\rangle = \Lambda\Sigma \to \Lambda\Omega$ - включаем в $A(r)$

$$U_J(r) = U(r) + A(r)\Omega + B(r)\left[J(J+1) - 2\Omega^2\right]$$

$A(r), B(r), U(r)$ - разложим вблизи min эл. терма:

$\xi = r - r_e \Rightarrow U(r) = U_e + \frac{1}{2}\mu\omega_e^2\xi^2$, $U_e = U(r_e)$

$A(r) = A_e \equiv A(r_e)$; $B(r) = B_e \equiv B(r_e)$

$$U_J(r) = U_e + A_e\Omega + B_e\left[J(J+1) - 2\Omega^2\right] + \frac{1}{2}\mu\omega_e^2\xi^2$$

Задача свелась к задаче о гарм. осцилляторе:

$$E = U_e + A_e\Omega + B_e\left[J(J+1) - 2\Omega^2\right] + \hbar\omega_e\left(v + \frac{1}{2}\right) \to \,?$$

23(a

Случай в) взаимод. спин-ось мало по сравнению...

$E_{\text{сп-ось}} \ll \Delta E_r$

Кв. число K - сущ.

Вспомним сингл. терм. Пренебрежем спином:

$U_K(r) = U(r) + B(r)K(K+1)$; $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{K}} + \hat{\vec{S}}$

$K - S \leq \hat{\vec{J}} \leq K + S$

Глава 1. Атом.

1. Атомные уровни энергии.
2. Состояние электронов в атоме.
3. Водородоподбные уровни энергии.
4. Самосогласованное поле.
5. Рентгеновские термы.
6. Статистический метод Томаса-Ферми.
7. Тонкая структура атомных уровней.
8. Периодическая система элементов Д.И.Менделеева.
9. Мультипольные моменты.
10. Атом в электрическом поле.

Глава 2. Упругое и неупругое рассеяние.

11. Общая теория рассеяния.
12. Формула Борна.
13. Рассеяние медленных частиц.
14. Рассеяние заряженных частиц кулоновским полем.
15. Столкновения тождественных частиц.
16. Упругое рассеяние при наличии неупругих процессов.

Глава 3. Движение в магнитном поле.

17. Уравнение Шредингера в магнитном поле.
18. Движение в однородном магнитном поле.
19. Атом в магнитном поле.

Глава 4. Двухатомная молекула.

20. Электронные термы двухатомной молекулы.
21. Валентность.
22. Колебательная и вращательная структуры синглетных термов двухатомной молекулы.
23. Мультиплетные термы: а) взаимодействие спин-ось велико по сравнению с расстоянием между вращательными уровнями.
24. Мультиплетные термы: б) взаимодействие спин-ось мало по сравнению с расстоянием между вращательными уровнями.

25. Силы Ван дер Ваальса.

26*. Уравнение Липпмана- Швингера.