09.02.12.

Бережной Юрий Анатольевич

Квантовая механика

экзамен: 2 теор. вопроса + 1 задача   названия § - вопросы к билетам
к. 410 - вопросы

Ландау, Лифшиц „Кв. механика"
Давыдов
Галицкий, Корнаков - задачник

1 глава. Основные понятия квант. механики

1§. Физ. основы кв. механики

1) Излучение черн. тела   Макс Планк   кванты света
1900 год   идея корпускулярно-волнового дуализма квант. объекта

$E = \hbar \cdot \omega \qquad \hbar = \frac{h}{2\pi} = 1{,}054 \cdot 10^{-34}$ Дж·с

2) 1905 год   фотоэффект   Эйнштейн   СТО, ф/э, броуновское дв. е
корпуск. структ. э/м излучения

3) строение атома   ат. ядро   1911г. Эрнест Резерфорд
1913 год Нильс Бор   постулаты
1925-27 гг.   Кв. мех.
Н. Бор предположил, что
есть стац. орбиты на кот-х $\bar{e}$ не
излучает (это против. кв. мех.)

согласно класс. электродин.
заряд. движ. по криволин. тракт.
должен излучать → е должен
упасть на ядро (атом
коллапсирует)
противоречие с экспериментом

4. Луи де Бройль: корпуск.-волн. дуализм должен быть распространен на все объекты

1923-24 гг. дифф. $\bar{e}$ на щели

с какими объектами имеет дело кв. мех?
все объекты невооруж. глазом (и оптич. телескоп) - подчиняются класс. физ.

$R_{кл.} > 10^{-6}$ м
$R_{кв.} < 10^{-8}$ м

мин. размеры лежат в эт. интервал:
мол., ат. ядра, элемент. частицы
з-ны движ. и структуру кот-х изуч. кв. мех.

сверхпроводимость, сверхтекучесть, холодная эмиссия атомов из Met

1925 год. ур-е Шредингера - лежит в основе нерелятив. кв. мех.
(волновое ур-е) по типу: ур-е теплопров-ти
↓
определяет волн. ф-ю

Вернер Гайзенберг: соотношение неопределенностей показывает, что есть пары физ. величин (сопряж. величины) есть предел точности измер. физ. вел.

коорд. - импульс - одна из пар. ⇒ <u>у микрообъекта нет траектории</u>
$\vec{p}(\vec{r})$ $p_x(x)$ в одномерн. сл.

<u>Нет у $\bar{e}$ орбит в атоме!</u>

Измерение физ. величин в класс. физ. пренебрегаем воздейств. прибора на объект, кот. измеряем
в кв. физике прибор д.б. макроскопич. (его возд. явл. неконтролируемым)
Всегда измерит. прибор вносит сущ. возд. на акт измерения
кв. мех. явл. наукой вероятностной; кв. мех. по рез-ту предыдущ. измер. может предсказать вероятность послед. измер.

корпускулярно-волновой дуализм кв. объекта

1) по одновременно мы не можем наблюдать: либо корпускул., либо волновые св-ва

2) спектр энергии ē в ат. дискретный - идея квантования (некот. велич. дискретные)

у своб. ē - непр. спектр энергии.

$\boxed{\lambdabar = \frac{\hbar}{p}}$ де-Бройлевская дл. волны $\lambdabar = \frac{\lambda}{2\pi}$

! понятие дл. волны присуще только своб. част.
(if в яме, барьере возникает неопред. в λ порядка препятствия)

§2. Принцип суперпозиции

совокупность координат, рассматриваемой сист. $q = (q_1, q_2, \dots)$

$q = (q_1, q_2, \dots)$ – образ. конфигурационное пр-во

$dq = \prod_{i=1}^{N} dq_i$ - элемент объема конфигурац-го пр-ва

1 част. $dq = d^3r$ $\Psi(q,t)$ - амплитуда вероятности

основа мат. аппарата кв. мех: $\Psi(q)$ - волновая ф-я

причем квадрат модуля волн. ф-ции

$|\Psi(q)|^2 dq$ - вероятность того, что произвед-е над сист. измерение обнаружит знач. коорд-т в инт-ле $(q, q+dq)$

Знание волн. ф-ции позволяет вычисление вер. всякого измерения (не только коорд-ты)

С течением вр. сост. сист. и волн. ф-я меняется $\Psi(q,t)$

if мы знаем волн. ф. в опред. момент вр. - то должны знать и в др. мом. вр.

дифференциальная вероятность $|\Psi(q)|^2 dq$

полная вер-ть $W = \int dq |\Psi(q)|^2 = 1$, при условии, что $\int$ сходится

усл-е нормировки. if $\int$ - расх, волн. ф. надо нормир. др. способом пр-п суперпозиции состояний: if квант. сист. может наход. в сост., описываемом волн. ф. $\Psi_1(q)$ и некоторое измерение над ней приводит, в этом случае, к определ. рез-ту I, а в состоянии, описываемом в.ф. $\Psi_2(q)$ к опред. рез-ту II, то волн. ф. также может нах. в сост., описываемом в. ф. $\Psi(q) = a_1 \cdot \Psi_1(q) + a_2 \cdot \Psi_2(q)$, в котором то же самое измер. дает либо рез-т I, либо рез-т II с вероятностью $|a_1|^2$, $|a_2|^2$.

$$\boxed{\text{в. ф. д.с. в кв. мех ортонормированны: } \int dq\, \Psi_i^*(q)\Psi_k(q) = \delta_{ik}}$$

соотношение ортонорм-ти

$\Psi_1(q)$ I

$\Psi_2(q)$ II

$\Psi(q) = a_1 \cdot \Psi_1(q) + a_2 \cdot \Psi_2(q)$

I $|a_1|^2$

II $|a_2|^2$

$|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1$

полная вероятность

a_1, a_2 - комплексные

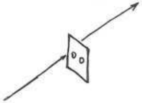
разлож. волн. ф. по базису двух ф-й

$$\Psi(q) = \sum_i a_i \Psi_i(q) \quad \rightarrow \quad \sum_n |a_n|^2 = 1$$

обобщение на случай произвольного числа состояний

$$dw = \{|a_1|^2 \cdot |\Psi_1(q)|^2 + |a_2|^2 \cdot |\Psi_2(q)|^2 + 2\,\mathrm{Re}\, a_1 a_2^* \Psi_1(q)\Psi_2^*(q)\}\, dq$$

интерференционный член (связано с пр-м суперпозиции сост)



if сист. состоит из двух частей, которые не взаимод. (слабо взаимод), то волн. ф-я всей сист. $\Psi_{12}(q) = \Psi_1(q_1) \cdot \Psi_2(q_2)$

факторизуется

можно считать, что вероятность коорд. q_1 первой части не зависит от вероятн. коорд. q_2 второй части. (стр. 23)

$$|\psi|^2 = \psi \cdot \psi^* = (a_1\psi_1 + a_2\psi_2)(a_1^*\psi_1^* + a_2^*\psi_2^*) = |a_1|^2|\psi_1|^2 + |a_2|^2|\psi_2|^2 + a_1\psi_1 a_2^*\psi_2^* + a_2\psi_2 a_1^*\psi_1^* =$$

$$= |a_1|^2|\psi_1|^2 + |a_2|^2|\psi_2|^2 + \underbrace{a_1 a_2^* \psi_1 \psi_2^*}_{z} + \underbrace{(a_1 a_2^* \psi_1 \psi_2^*)^*}_{z^*} = |a_1|^2|\psi_1|^2 + |a_2|^2|\psi_2|^2 + 2\,\mathrm{Re}\, a_1 a_2^* \psi_1 \psi_2^*$$

$$\mathrm{Re}\, z = \frac{z + z^*}{2}$$

§ 3.1 Операторы

f - физ. величина, хар-я сост. неком. кв. системы

значения величины f - собств. знач., а их совокупность - спектр собств. зн.

дискретный спектр: $f_1, f_2, \dots f_n$

непр. спектр: $f_I \leq f \leq f_{II}$

рассмотрим дискр. спектр:

$f: \ f_1, f_2, \dots f_n$

обозначим волн. ф-ю сист. $\longrightarrow$ $\Psi_1(q)\ \Psi_2(q)\ \ \Psi_n(q)$ - собств. ф-ции данной физ. величины f.

в.ф. д.б. нормированы: 1) $\int dq |\Psi_n(q)|^2 = 1$

разложим волнов. ф. в ряд по полному набору ф. $\Psi_n(q)$:

$$\Psi(q) = \sum_n a_n \Psi_n(q)$$

ортонорм. базис должны образ. полную сист. ортогон-х ф-й

$\sum_n |a_n|^2 = 1$ 2) $\int dq\, \Psi_n^*(q) \cdot \Psi_m(q) = \delta_{nm}$ ортогональны

$$\int dq\, \Psi_m^*(q) \cdot \Psi(q) = \sum_n a_n \int dq \cdot \Psi_m^*(q) \Psi_n(q) = a_m \qquad \boxed{a_m = \int dq\, \Psi_m^*(q) \Psi(q)}$$

$\langle f \rangle = \sum_n f_n |a_n|^2 \longrightarrow$ ср. знач. физ. величины

14.02.12.

Гильбертово сепарабельное пр-во

$\Psi(q) = \sum_n a_n \cdot \Psi_n(q)$ $a_m = \int dq\, \Psi_m^*(q) \Psi(q)$ - коэф-т

$\langle f \rangle = \sum_n |a_n|^2 f_n$ ср. зн. физ. велич.

$\boxed{\langle f \rangle = \int dq\, \Psi^*(q)\, \hat{f}\, \Psi(q)}$ ср. знач. физ. велич. f (через волнов. ф-ции)

опер-р $\hat{f}$ д.б. линейным $\Psi(q) = a_1 \cdot \Psi_1(q) + a_2 \cdot \Psi_2(q)$ все ур. д.б. линейные

пр-п суперпозиции

опер-ры линейные

пр-ва линейны

---

def: опер-р наз. линейным, if $\hat{f}(a_1\Psi_1 + a_2\Psi_2) = a_1 \hat{f}\Psi_1 + a_2 \hat{f} \Psi_2$

для $\forall$ в.ф. Ψ_1, Ψ_2 и комплекс-х const a_1, a_2

$< f > = \sum_n a_n a_n^* f_n$ $a_n^* = \int dq \cdot \Psi_n(q) \cdot \Psi^*(q)$ $< f > = \int dq\, \Psi^*(q) \left[\sum_n a_n f_n \Psi_n(q) \right]$

$\hat{f}\, \Psi(q) = \sum_n a_n f_n \Psi_n(q)$ действие опр. $\hat{f}$ на ф-ю $\Psi(q)$ $< f > = \int dq \cdot \Psi^*(q)\, \hat{f}\, \Psi(q)$

$\sum_n a_n \hat{f}\, \Psi_n(q) = \sum_n a_n f_n \Psi_n(q)$ $\boxed{\hat{f}\, \Psi_n(q) = f_n \Psi_n(q)}$

собств. ф. опр. $\hat{f}$ — собств. знач.

собств. зн. f_n должно быть действит-но

$f_n^* = f_n$, $< f >^* = < f >$ — действ. числа

Это наклад. опред. огранич. на класс опер-в $\longrightarrow$

<u>def:</u> опер. р наз. <u>транспонир-м</u>, if выполнено рав-во: $\int dq\, \varphi(q) \hat{f}\, \Psi(q) = \int dq\, \Psi(q) \tilde{\hat{f}}\, \varphi(q)$

транспонир. оператор $\tilde{\hat{f}}$

т.к. знач. д.б действ-но

$< f > = \underline{\int dq \cdot \Psi^*(q)\, \hat{f}\, \Psi(q)} = \int dq\, \Psi(q) \tilde{\hat{f}}\, \Psi^*(q) = \left[\int dq\, \Psi^*(q) \cdot \tilde{\hat{f}}^* \Psi(q) \right]^* = \underline{\int dq\, \Psi^*(q) \tilde{\hat{f}}^* \Psi(q)}$

есть ср. знач. физ. вел. f в состоянии, описыв-м в. ф. $\Psi(q)$

$\hat{f}^+ \equiv \boxed{\hat{f} = \tilde{\hat{f}}^*}$ - эрмитовские (самосопряж) операторы

$\hat{f} = \hat{f}^+ \rightarrow$ для оператора соотв-го физ. величине должно выполняться

[собств. ф. эрмит. опер-в ортогональны. <u>док-во:</u> $\rightarrow$

$\Psi_m^* \mid \hat{f}\, \Psi_n(q) = f_n \Psi_n(q)$ — предполагаем, что $f_n \neq f_m$ - это разные собств. знач.

$\hat{f}\, \Psi_m(q) = f_m \Psi_m(q)$ — ур-е на собств. ф. и собств. знач.

$\Psi_n(q) \cdot \mid \hat{f}^* \Psi_m^*(q) = f_m \cdot \Psi_m^*(q)$ $\ominus$

$\Psi_m^*(q)\, \hat{f}\, \Psi_n(q) - \Psi_n(q)\, \hat{f}^* \Psi_m^*(q) = (f_n - f_m) \Psi_n \Psi_m^*$

$\int dq\, \Psi_m^*(q) \hat{f}\, \Psi_n(q) - \int dq\, \Psi_n(q)\, \hat{f}^* \Psi_m^*(q) = (f_n - f_m) \int dq\, \Psi_n(q) \cdot \Psi_m^*(q)$

транспонир.

$\int dq\, \Psi_m^*(q) \hat{f}\, \Psi_n(q) - \int dq \cdot \Psi_m^*(q)\, \tilde{\hat{f}}^* \Psi_n(q) = (f_n - f_m) \int dq\, \Psi_n(q) \Psi_m^*(q) = 0$

$$\boxed{\int dq \cdot \Psi_n(q) \cdot \Psi_m^*(q) = \delta_{mn}}$$

§3.2. Алгебра операторов

1) $\hat{f}\Psi_n = f_n\Psi_n$ операторы могут иметь совместную сист. собств. ф-й

$\hat{g}\Psi_n = g_n\Psi_n$ $\quad \hat{f}\hat{g}\Psi_n = \hat{f}(\hat{g}\Psi_n) = \hat{f}(g_n\Psi_n) = g_n\hat{f}\Psi_n = g_n f_n\Psi_n$

$\hat{g}\hat{f}\Psi_n = \hat{g}(\hat{f}\Psi_n) = \hat{g}(f_n\Psi_n) = f_n\hat{g}\Psi_n = f_n g_n\Psi_n$

if два опер. соотв. физ. велич. кот. могут быть одновременно измерены

$(\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f})\Psi_n = 0$ $\quad \boxed{\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f} = [\hat{f}, \hat{g}] = 0 \text{ коммутатор операторов}}$

$[\hat{f}\hat{g}] = 0$, то операторы $\hat{f}$ и $\hat{g}$ коммутируют

$\hat{f}^{k}$ - оператор, возведенный в степень явл. частн. случ. произвед. опер-в

$\varphi(\hat{f})$

ф-ции разложимые в ряд Тейлора (имеют произв. $\forall$ пор.)

$\varphi(\hat{f})\Psi_n = \varphi(f_n)\Psi_n$

---

2) операторы $\hat{f}$ и $\hat{g}$ соотв. физ. вел-н, кот. не могут быть измерены одновр. со сколь угодно больш. точностью

$$\int dq\,\Psi\,\hat{f}\hat{g}\,\varphi = \int dq\,\Psi\,\hat{f}(\hat{g}\,\varphi) = \int dq\,(\hat{g}\,\varphi)(\tilde{\hat{f}}\Psi)$$

$$\int dq\,(\tilde{\hat{f}}\Psi)\,\hat{g}\,\varphi = \int dq\,\varphi\,\tilde{\hat{g}}\,\tilde{\hat{f}}\,\Psi$$

транcп.

$$\int dq\,\Psi\underbrace{(\hat{f}\hat{g})}_{\text{как единый опер-р}}\varphi = \int dq\,\varphi\,\widetilde{\hat{f}\hat{g}}\,\Psi$$

$\Rightarrow \widetilde{\hat{f}\hat{g}} = \tilde{\hat{g}}\cdot\tilde{\hat{f}}$

компл. сопр.

$$\boxed{(\widetilde{\hat{f}\hat{g}})^{*} = \tilde{\hat{g}}^{*}\,\tilde{\hat{f}}^{*} \qquad (\hat{f}\hat{g})^{+} = \hat{g}^{+}\hat{f}^{+} = \hat{g}\hat{f}}$$

для эрмит. опер-в

$(\hat{f}\hat{g})^{+} = \hat{g}\hat{f}$

if $\hat{g}$ и $\hat{f}$ коммут. то опер-р эрмит.

if -II- не коммут. $(\hat{f}\hat{g})^{+}$ не эрмит.

$\boxed{(\hat{f}\hat{g})^{+} = \hat{f}\hat{g}}$

$[\hat{f}\hat{g}] \neq 0$ if две опер. физ. вел-ны не коммут. то их нельзя измерить со сколь уг. б. точн.

физ. величине должен обяз-но соотв-ть эрмит. опер-р

$$\begin{cases} \frac{1}{2}(\hat{f}\hat{g} + \hat{g}\hat{f}) - & \text{явл. эрмит. опер. } \hat{f} \text{ и } \hat{g} \text{ не коммутир.} \\ i[\hat{f}, \hat{g}] - & \text{явл. эрмит. опер.} \end{cases}$$

§ 3.3. Непрерывный спектр

физ. вел. f может принимать непр. ряд знач. $\Psi_f(q)$ - собств. ф-я физ. велич. f, в случае непр. спектра собств-х знач. рассматр. физ. величины

$$\Psi^*_{f'}(q) \Big\} \Psi(q) = \int df\, a_f \Psi_f(q) \qquad a_f \equiv a(f)$$

$$\underline{\int dq \Psi^*_{f'}(q)\Psi(q)} = \int dq\, \Psi^*_{f'}(q)\, a_f \Psi_f(q)\, df = \int df\, a_f \underbrace{\int dq\, \Psi^*_{f'}(q)\Psi_f(q)} = a_{f'}$$

по аналогии с дискр. спектром

$$\boxed{\int dq \cdot \Psi^*_{f'}(q) \cdot \Psi_f(q) = \delta(f' - f)}$$

собств-е ф-ции нормируются на δ-функцию $\int df\, a_f \delta(f'-f) = a_{f'}$

↓

условие нормировки для непр. спектра

$$\int dq \cdot \Psi^*(q)\Psi(q) = \int dq \int df\, a^*_f \Psi^*_f(q) \int df' a_{f'} \Psi_{f'}(q) =$$

$$= \int df' df\, a^*_f a_{f'} \underline{\int dq\, \Psi^*_f(q)\Psi_{f'}(q)} = \boxed{\int df \underbrace{|a_f|^2}_{\text{плотн. вер-ти}} = 1}$$

величина $|a_f|^2 \cdot df = dw$ предст. собой вероятн. того, что физ. велич., описыв. волн. ф. $\Psi_f(q)$ имеет знач. лежащие в интервале $(f, f + df)$

$$\iint df' df\, a^*_f a_{f'} \delta(f'-f) = \int df\, a^*_f a_f$$

$|\Psi(q)|^2 dq$ — плотн. вер.

$\Psi_n(q)$ — для дискр. спектра; $\Psi_f(q)$ - для непр. спектра

<u>n</u> и <u>f</u> наз. <u>индекс-состояние</u>

<u>q</u> наз. <u>индекс-представление</u> (координатное представление)

$$\int df' a_{f'} \delta(f'-f) = a_f$$

δ-ф-я - это обобщенная ф-я (не явл. аналитич. функцией)

δ-ф-ей наз. ф-я $\delta(x) = \begin{cases} 0, & x \neq 0 \\ \infty, & x = 0 \end{cases} \qquad \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \delta(x) = 1$

$$\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} dx\, f(x)\, \delta(x-a) = f(a)$$

<u>Св-ва:</u>

1. $\delta(-x) = \delta(x)$ четная ф-я
2. $\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x)$
3. $\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt\, e^{itx}$ разложение δ-ф. в ∫ Фурье
4. $\lim\limits_{\gamma \to 0} \frac{\gamma}{\gamma^2 + x^2} = \pi \delta(x)$
5. $\delta[y(f') - y(f)] = \frac{1}{\left|\frac{dy(f)}{df}\right|} \cdot \delta(f' - f)$

$a_f = \int dq' \Psi_f^*(q')\cdot\Psi(q')$ $\quad$ $\Psi(q) = \int df\, a_f \Psi_f(q) = \int df \int dq' \Psi_f^*(q')\Psi(q')\Psi_f(q) =$

$$= \int dq'\, \Psi(q') \underbrace{\int df\, \Psi_f^*(q')\Psi_f(q)}_{\text{δ.ф.}} = \Psi(q)$$

$\int df\, \Psi_f^*(q')\Psi_f(q) = \delta(q'-q)$ $\qquad$ $\int dq\, \Psi_{f'}^*(q)\Psi_f(q) = \delta(f'-f)$

усл. полноты $\qquad$ усл. нормировки

для дискр. спектра усл. полноты: $\sum_n \Psi_n^*(q')\Psi_n(q) = \delta(q'-q)$

16.02.12.

§4 Предельный переход к класс. механике

$\hbar \to 0$ $\quad$ геом. оптика - волнов. оптика с малыми дл. волн

$u = a e^{i\varphi}$ $\quad$ Большая величина фазы φ → волновая опт. → к геом. оптике

по аналогии $\quad$ в оптике траект. опред. пр-м Ферма (изменение фазы вдоль пути min)

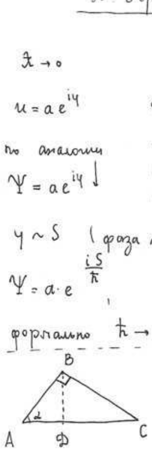
$\Psi = a e^{i\varphi}$ ↓ $\quad$ изменение действ. вдоль траект. - min. (в клас. мех.)

$\varphi \sim S$ (фаза ~ действию) $\quad$ действие имеет размерность

$\Psi = a\cdot e^{\frac{iS}{\hbar}}$ $\quad$ действие не квантуется (пост. Планка - не квант действия)

квазиклассическая волновая функция

формально $\hbar \to 0$; $\vec{p}(\vec{r})$ - появл. понятие квазикласс-х траекторий



$S_{ABC} = AC^2 f(\alpha)$ $\quad$ площадь есть квадрат длины

$S_{ABD} = AB^2 \cdot f(\alpha)$ $\quad$ $f(\alpha)\, AC^2 = AB^2 f(\alpha) + BC^2 \cdot f(\alpha)$

$S_{BCD} = BC^2 \cdot f(\alpha)$ $\quad$ т. Пифагора

глава 2. Энергия и импульс.

§1. Гамильтониан

$\Psi(q,t)$, $\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi(q,t)}{\partial t} = \hat{H}\,\Psi(q,t)}$ из пр-па суперпозиции соотнош-е д.б линейно

→ волновое ур-е (ур-е Шредингера), 1926 год

$$\underbrace{\frac{d}{dt}\int dq\, \Psi^*(q,t)\Psi(q,t)}_{\text{нормировка волн. ф-ции}} = \int dq\left[\frac{\partial \Psi^*(q,t)}{\partial t}\Psi(q,t) + \Psi^*(q,t)\cdot\frac{\partial \Psi(q,t)}{\partial t}\right] = 0$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Psi, \quad \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\hat{H}^*\Psi^*$$

$$\frac{i}{\hbar}\int dq\left[\Psi\hat{H}^*\Psi^* - \Psi^*\hat{H}\Psi\right] = \frac{i}{\hbar}\int dq\left[\Psi^*\tilde{\hat{H}}^*\Psi - \Psi^*\hat{H}\Psi\right] =$$

$$= \frac{i}{\hbar}\int dq\,\Psi^*\left[\hat{H}^+ - \hat{H}\right]\Psi = 0 \qquad \hat{H}^+ = \hat{H}$$

$\hat{H}$ - д.б. эрмитовским опер-м (самосопряж. опер-м)

$\hat{H}$ - должен соотв-ть физ. величине

Совершим переход к класс. мех-ке: $\Psi = a e^{\frac{iS}{\hbar}}$ фаза быстро меняется; a - амплитуда, медленно меняющаяся величина

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{ia}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial t}e^{\frac{iS}{\hbar}} = \frac{i}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial t}\Psi \quad (\to \text{в ур-е Шред})$$

$$\boxed{-\frac{\partial S}{\partial t} = \hat{H}} \qquad \boxed{-\frac{\partial S}{\partial t} = H}$$ класс. ф-я гамильтона

энергия - сохраняющаяся ф-я гамильтона

$\hat{H}$ - оператор гамильтона (гамильтониан)

§2. Дифференцирование опер-в по времени

в класс. мех. $f(t)$: $\dot{f}(t) = \frac{d}{dt}f(t) = \lim\limits_{\Delta t \to 0}\frac{f(t+\Delta t) - f(t)}{\Delta t}$

в кв. мех: $\left\| \begin{array}{l} f(t) \to \hat{f} \\ \dot{f}(t) \to ? \end{array} \right\|$ постановка задачи в кв.мех: какой оператор надо сопоставить произв. ф. от физ. вел. f - ?

$$\langle \dot{f}\rangle = \frac{d}{dt}\langle f\rangle = \frac{d}{dt}\int dq\,\Psi^*(q,t)\hat{f}\,\Psi(q,t) = \int dq\left[\Psi^*\frac{\partial \hat{f}}{\partial t}\Psi + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\hat{f}\Psi + \Psi^*\hat{f}\frac{\partial \Psi}{\partial t}\right] =$$

$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Psi$ $\qquad = \int dq\left[\Psi^*\frac{\partial \hat{f}}{\partial t}\Psi + \frac{i}{\hbar}\left[(\hat{H}^*\Psi^*)\hat{f}\Psi - \Psi^*\hat{f}\hat{H}\Psi\right]\right] =$

$\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\hat{H}^*\Psi^*$ $\qquad = \int dq\left[\Psi^*\frac{\partial \hat{f}}{\partial t}\Psi + \frac{i}{\hbar}\left[(\hat{f}\Psi)\hat{H}^*\Psi^* - \Psi^*\hat{f}\hat{H}\Psi\right]\right] =$

$$= \int dq\left[\Psi^*\frac{\partial \hat{f}}{\partial t}\Psi + \frac{i}{\hbar}\left[\Psi^*\tilde{\hat{H}}^*\hat{f}\Psi - \Psi^*\hat{f}\hat{H}\Psi\right]\right] = \int dq\,\Psi^*\left[\frac{\partial \hat{f}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}\hat{f} - \hat{f}\hat{H}\right]\right]\Psi$$

$$= \int dq\, \Psi^* \left[\frac{\partial \hat{f}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H} \hat{f}] \right] \Psi \qquad \tilde{\hat{H}}^* = \hat{H}^+ = \hat{H}$$

$$\langle \dot{f} \rangle = \int dq\, \Psi^* \hat{\dot{f}}\, \Psi, \quad \boxed{\hat{\dot{f}} = \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{f}]}$$

так в кв. мех. опред-ся оператор производной по вр. от физ. величины

очень важной категорией физ. величин есть физ. велич. кот. не зав. от вр. явно и коммутируют с гамильтонианом. (они сохраняются) 1) явно не зав-т от вр: $\frac{\partial \hat{f}}{\partial t} = 0$

Из (1) и (2) ∃:

$\boxed{\hat{\dot{f}} = 0}$ Класс операторов, соотв-х сохр-ся физ. величинам

2) коммут. с гамильт. $[\hat{H}, \hat{f}] = 0$

$\langle \dot{f} \rangle = 0 \quad \langle f \rangle = \text{const} \Leftarrow \frac{d\langle f \rangle}{dt} = 0$

в клас. мех. (гамильтонов формализм) q и p

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial f}{\partial q_i} \dot{q}_i + \sum_i \frac{\partial f}{\partial p_i} \dot{p}_i = \left\{ \begin{aligned} \dot{q}_i &= \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i &= -\frac{\partial H}{\partial q_i} \end{aligned} \right\} = \frac{\partial f}{\partial t} + \underbrace{[H, f]_{\text{кл.}}}_{\text{классические скобки Пуассона}}$$

класс. ур. Гамильтона

$$[H, f]_{\text{кл.}} = \sum \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right)$$

$$[\hat{H}, \hat{f}] \to -i\hbar [H, f]_{\text{кл.}}$$

коммутатор наз. квантовой скобкой Пуассона

§3. Стационарные состояния

замкнут. физ. сист. - сист. не нах. в перем-х внешн. полях, то для такой сист. время - однородно.

в клас. мех из однор. $t \to$ з-н сохр. энергии

$\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$ гамильтониан не может явно зависеть от времени

$\dot{\hat{H}} = 0$ з-н сохр. энергии: ‖ if в данном сост. энергия физ. сист. имеет опред. знач., то она будет иметь это же знач. во все последующие мом. вр. т.е. будет сохр-ся. ‖

def: состояния, в кот-х сохр. энергия наз. стацион. состояниями.

волн. ф-я факторизуется ⇒ переменные раздел. ? $\boxed{\Psi_n(q,t) = \psi_n(q) \cdot \varphi_n(t)}$

if $\hat{H}$ явно не зав. от t

дискр. спектр

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_n(q,t)}{\partial t} = \hat{H}\,\Psi_n(q,t) \qquad i\hbar\, \psi_n(q)\cdot\frac{\partial \varphi_n(t)}{\partial t} = \hat{H}\,\psi_n(q)\,\varphi_n(t) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow i\hbar\, \psi_n(q)\cdot\frac{\partial \varphi_n(t)}{\partial t} = \varphi_n(t)\cdot\hat{H}\,\psi_n(q) \quad \Big| : \Psi_n(q,t) = \psi_n(q)\cdot\varphi_n(t) \qquad \hat{H} = -\frac{\partial S}{\partial t}$$

$$i\hbar\,\frac{\dot\varphi_n(t)}{\varphi_n(t)} = \frac{1}{\psi_n(q)}\hat{H}\,\psi_n(q) = C_n = const = E_n$$

$$i\hbar\,\frac{\dot\varphi_n(t)}{\varphi_n(t)} = E_n\,, \quad \boxed{\varphi_n(t) = C\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}} \qquad \Psi_n(q,t) = \psi_n(q)\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

вр. зав-ть всех волн-х ф-й стацион-х сост-й

$$\Psi(q,t) = \sum_n a_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\,\psi_n(q)$$ разлож. произв. ф. по полному набору волн-х ф-й стац. сост.

$$|\Psi_n(q,t)|^2 = |\psi_n(q)|^2$$

$$\langle f\rangle = \int dq\,\Psi_n^*(q,t)\,\hat f\,\Psi(q,t) = \int dq\,\psi_n^*(q)\,\hat f\,\psi_n(q)$$

Среди разл-х стац-х сост-й могут быть сост. n_1, E_{n1}; может оказаться что этому сост. соотв. <u>несколько волн-х ф-й.</u>

одному и тому же стац. сост. соотв. неск. разных волн-х ф-й → это <u>вырожденное состояние</u> (if 3 волн. ф – трехкратное вырожд.) Система хар-ся не только энергией, есть и др. ф-ия

$\psi_{n_1,m}(q)$ $\quad n=1,2,\dots s \quad$ s-кратное вырождение

$\forall$ лин. комбин. $\sum d_n \psi_{n1,m}(q) = \chi_{n1}(q)$ → волн. ф. выражает то же состояние

21.02.12.

if гамильтониан системы предст. собой сумму неск-х частей, одна из ком-х содерж. только коорд. q_1, др. q_2, то волн. ф-ю такой сист. можно представить в виде произвед-й.

$$\hat H = \hat H_1(q_1) + \hat H_2(q_2) + \dots$$

$$\hat H_1(q_1)\psi_1(q_1) = E_1\psi_1(q_1), \quad \hat H\psi(q_1 q_2,\dots) = E\psi(q_1,q_2,\dots) \quad E = E_1 + E_2 + E_3 + \dots$$

$$\hat H_2(q_2)\psi_2(q_2) = E_2\psi_2(q_2), \quad \psi(q_1,q_2,\dots) = \psi_1(q_1)\cdot\psi_2(q_2)\dots$$

стационарные сост. диск. спектра всегда соотв. финитн. дв-ю

<u>финитное дв-е</u> - рассматр-ая физ. сист. или ее части не уходят на ∞

фин. дв - случай связ-х сост-й ($\bar{e}$ в ат)

стац. сост. непр. спектра всегда соотв. инфинитному дв-ю

рассеяние энергии - непр. спектр

§4. Алгебра матриц

опер-ру всегда можно сопоставить матрицу

4.1. Матричный элемент

<u>дискр. спектр</u>: $\Psi = \sum\limits_n a_n \Psi_n \quad \langle f\rangle = \int dq\, \Psi^* \hat{f}\, \Psi = \sum\limits_n \sum\limits_m a_n^* a_m \int dq\, \Psi_n^* \hat{f}\, \Psi_m$

$\boxed{\int dq\, \Psi_n^* \hat{f}\, \Psi_m = f_{nm}(t)}$ - матричный элемент

совокупность величин $f_{nm}(t)$ образ. квадр. матрицу (м.б. бесконечной - матрица)

переход из $\underline{m}$ в $\underline{n}$

<u>непр. спектр</u>: $\Psi = \int dg\, a_g \Psi_g \quad \langle f\rangle = \int dq\, \Psi^* \hat{f}\, \Psi = \int dg\, dg'\, a_g^* a_{g'} \int dq\, \Psi_g^* \hat{f}\, \Psi_{g'}$

$\boxed{\int dq\, \Psi_g^* \hat{f}\, \Psi_{g'} = f_{gg'}(t)}$ - матр. эл-т (зав-т от вр)

4.2. Зависимость от t матр. эл. в стац-х сост-й

$\Psi_n = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\psi_n(q), \quad f_{nm}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)t} f_{nm} = e^{i\omega_{nm}t} f_{nm}$

$\boxed{\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar}}$ - частота перехода из сост. m в n

$f_{nm} = \int dq\, \psi_n^* \hat{f}\, \psi_m$

определим матр. эл-т от произв. по вр. от физ. величины:

$$\langle \dot{f} \rangle = \frac{d}{dt}\langle f \rangle = \sum_n \sum_m a_n^* a_m \dot{f}_{nm}(t) \qquad \dot{f}_{nm}(t) = i\omega_{nm} f_{nm}(t)$$

$$\dot{f}_{nm}(t) = (\dot{f})_{nm} e^{i\omega_{nm}t}$$ → любой матр. эл-т должен иметь такой вид

$$\boxed{(\dot{f})_{nm} = i\omega_{nm} f_{nm}}$$ - матр. эл-т

4.3 $f \to \hat{f}$, $f^* \to ?$

? $$\langle f^* \rangle = \langle f \rangle^* = \left[\int dq (\psi^* \hat{f}\psi)\right]^* = \int dq \psi \hat{f}^* \psi^* \overset{\text{трансп.}}{=} \int dq \psi^* \tilde{\hat{f}}^* \psi = \int dq \psi^* \hat{f}^+ \psi$$

ср. знач. есть величина действ-я для физ. величин

$$f^* \to \hat{f}^+$$

для матричных эл-в комплексно-сопр. величины

$$(f^*)_{nm} = \int dq \psi_n^* \hat{f}^+ \psi_m = \int dq \psi_n^* \tilde{\hat{f}}^* \psi_m \overset{\text{трансп.}}{=} \int dq \psi_m \hat{f}^* \psi_n^* = \left(\int dq \psi_m^* \hat{f} \psi_n\right)^* =$$

$$= f^*_{mn}$$

$$\boxed{(f^*)_{nm} = f^*_{mn}}$$ эрмитовские матрицы

$n = m$ $\quad f_{nn}$ - диагон. матр. эл-т $\quad f_{nn} = \langle f \rangle_n$

в эрмит. матрице все диаг. матр. эл-и действ-е и предст. собой средние знач. физ. величины (и от вр. не зав-т)

4.4. Правила умножения матриц в кв. мех.

$$\psi_k(q) \left\{ f_{kn} = \int dq' \psi_k^*(q') \hat{f} \psi_n(q') \right\} \quad \sum_k f_{kn}\psi_k(q) = \int dq' \underbrace{\Big(\sum_k \psi_k(q)\psi_k^*(q')\Big)}_{\delta(q-q')} \hat{f}\psi_n(q') =$$

(усл-е полноты)

$$= \int dq' \delta(q-q') \hat{f} \psi_n(q') = \hat{f}\psi_n(q)$$

$$\boxed{\hat{f}\psi_n(q) = \sum_k f_{kn}\psi_k(q)}$$

разложить по полному набору ф-й ψ_k, а коэф-разложения будут матр. элементы f_{kn}

$$\hat f \hat g \psi_n = \hat f(\hat g \psi_n) = \hat f \sum_k g_{kn}\psi_k = \sum_k g_{kn} \hat f \psi_k = \sum_k \sum_m g_{kn} f_{mk} \psi_m =$$

$$= \sum_m (\hat f \hat g)_{mn} \psi_m$$

$$\boxed{(\hat f \hat g)_{mn} = \sum_k f_{mk} g_{kn}}$$ пр-ло умножения матриц

4.5. Задание матрицы эквив. зад-ю оператора

$$\hat f \psi = f\psi \qquad \psi = \sum_m C_m \psi_m$$

разложим ф-ю ψ по собств. набору гамильтониана

$$\psi_n^* \Big| \sum_m C_m \hat f \psi_m = f \sum_m C_m \psi_m \qquad \hat f \psi_m = \sum_k f_{km}\psi_k$$

$$\sum_m C_m \underbrace{\int dq\, \psi_n^* \hat f \psi_m}_{f_{nm}} = f \sum_m C_m \underbrace{\int dq\, \psi_n^* \psi_m}_{\delta_{nm}}$$

$$\sum_m C_m (f_{nm} - f\delta_{nm}) = 0$$

система лин. однор-х алгебр-х ур-й 1 степени с неизв. велич. C_m

обладает нетрив. реш-м, if опред. $= 0$

$$\mathrm{Det}(f_{nm} - f\delta_{nm}) = 0$$

$$\begin{vmatrix} f_{11}-f & f_{21} & \vdots \\ f_{12} & f_{22}-f & \vdots \\ f_{13} & f_{23} & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{vmatrix} = 0$$

можно рассматр. как ур-е, из ком-го можно опред-ть собств-е знач. вел. f

ψ_n и ψ_m - собств. знач. физ. вел. f $\qquad \psi_n^* \cdot \Big| \hat f \psi_m = f_m \psi_m \Rightarrow$

$\Rightarrow f_{nm} = f_m \delta_{nm}$ – матрица имеет диаг. вид

Матр. физ. величины диагональна в представлении, в ком. диаг. матр. гамильт.

$[\hat f, \hat H] = 0$ матр. физ. велич. коммут. с гамильтонианом

4.6. Докажем, что if два опер-ра коммут-т др. с др., то они имеют общую полную сист. собств. ф-й.

$\hat f \hat g = \hat g \hat f$ в матричной форме $\sum_k f_{mk} g_{km} = \sum_k g_{mk} f_{km}$

в кач-ве исп. ф-й возьмем собств. ф-ции оператора f:

$\hat{f}\psi_n = f_n\psi_n$ $\quad f_{mk} = f_m\delta_{mk}$ матр. опер. f диагон. (в этом представлении)

$f_m g_{mn} = g_{mn} f_n$ $\quad g_{mn}(f_m - f_n) = 0$ if $m \neq n$ $g_{mn} = 0$ матр. опр. g тоже диагональна

волн. ф. ψ_n явл. собств. ф-ми как опр. f так и опр. g

4.7. $\hat{H}$, E_n, ψ_n все эти велич. зав-т от λ

$[\hat{H}(\lambda) - E_n(\lambda)]\psi_n(\lambda) = 0$ ур. е Шредингера

продиф. по λ

$$\psi_n^*(\lambda) \cdot \Big| [\hat{H}(\lambda) - E_n(\lambda)]\frac{\partial\psi_n(\lambda)}{\partial\lambda} = \left[\frac{\partial E_n(\lambda)}{\partial\lambda} - \frac{\partial\hat{H}(\lambda)}{\partial\lambda}\right]\psi_n(\lambda)$$

$$\int dq\, \psi_n^*(\lambda)[\hat{H}(\lambda) - E_n(\lambda)]\frac{\partial\psi_n(\lambda)}{\partial\lambda} \underset{\text{трансп.}}{=} \int dq\, \frac{\partial\psi_n(\lambda)}{\partial\lambda}[\tilde{\hat{H}}(\lambda) - E_n(\lambda)]\psi_n^*(\lambda) =$$

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

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

$$\boxed{\left(\frac{\partial\hat{H}(\lambda)}{\partial\lambda}\right)_{nn} = \frac{\partial E_n(\lambda)}{\partial\lambda}}$$

23.02.12.

4.8. Матр. эл-ты одной и той же велич. можно опред-ть в разл-х предст-х

Переход от одного набора ф-й к другому (от одного представл. к другому)

$\psi_n(q)$ - 2 полных набора ортонорм-х ф-й

$\varphi_n(q)$

$\varphi_n(q) = \sum_m F_{mn}\psi_m(q)$ $\quad \varphi_n(q) = \hat{F}\psi_n(q)$ $\quad \int dq\, \varphi_n^*(q)\varphi_m(q) = \delta_{mn}$ усл-е

матр. форма $\quad$ операторная форма ~~матр. форма~~ $\quad \int dq\, \psi_n^*(q)\psi_m(q) = \delta_{mn}$ ортонорм-ти

$$\int dq (\hat{F}^* \psi_n^*)(\hat{F}\psi_m) \overset{\text{меняем местами}}{=} \int dq (\hat{F}\psi_m)\hat{F}^*\psi_n^* \overset{\text{транспонир}}{=} \int dq \psi_n^* \tilde{\hat{F}}^* \hat{F}\psi_m = \int dq \psi_n^* \hat{F}^+ \hat{F}\psi_m = \delta_{mn}$$

$$y_n(q) = \sum_m F_{mn}\psi_n(q) \qquad y_n(q) = \hat{F}\psi_n(q)$$

$$\boxed{\hat{F}^+\hat{F} = 1}$$

$$\int dq\, y_n^*(q) y_m(q) = \delta_{mn} \qquad \int dq\, \psi_n^*(q)\psi_m(q) = \delta_{mn}$$

унитарные операторы

$$\boxed{\hat{F}^+ = \hat{F}^{-1}}$$

переход от одного базиса к др. осущ. с помощью унитарного оператора

$$\psi_n(q) = \hat{F}^{-1} y_n(q) \qquad \psi_n(q) = \sum_m F^*_{nm} y_m(q)$$

$$\int dq\, y_m^* \hat{f}_y y_n = \int dq (\hat{F}^*\psi_m^*)\hat{f}_y\hat{F}\psi_n = \int dq (\hat{f}_y \hat{F}\psi_n)\hat{F}^*\psi_m^* =$$

y - представление
(оператор действ. на y)

$$= \int dq\, \psi_m^* \hat{F}^+ \hat{f}_y \hat{F}\psi_n = \int dq\, \psi_m^* \hat{F}^{-1}\hat{f}_y\hat{F}\psi_n =$$

$$= \int dq\, \psi_m^* \hat{f}_\psi \psi_n; \qquad \boxed{\hat{f}_\psi = \hat{F}^{-1}\hat{f}_y\hat{F}} \qquad \boxed{\hat{f}_y = \hat{F}\hat{f}_\psi\hat{F}^{-1}}$$

унитарное преобраз. остав. inv длину вектора $\sum_n |y_n|^2 = \sum_n |\psi_n|^2$

$\forall$ унит. опер-р можно представить в такой форме $\hat{F} = e^{i\hat{R}}$

$\hat{R}$ - эрмитовский

4.9. Сумма диаг. эл-в матрицы

Spur
Trace

$$Sp\,\hat{f} \equiv Tr\,\hat{f} = \sum_n f_{nn}$$ - след матрицы или оператора

Св-ва:

$$Sp(\hat{f}\hat{g}) = Sp(\hat{g}\hat{f}) \quad \forall \hat{f},\hat{g}$$

$$Sp(\hat{f}\hat{g}\hat{h}) = Sp(\hat{h}\hat{f}\hat{g}) = Sp(\hat{g}\hat{h}\hat{f})$$ цикл. перестановка

$$Sp\,\hat{f}_y = Sp(\hat{F}\hat{f}_\psi\hat{F}^{-1}) = Sp(\hat{F}^{-1}\hat{F}\hat{f}_\psi) = Sp\,\hat{f}_\psi$$

§5. З-н сохр. импульса

з-н сохр. имп - следствие одпор-ти пр-ва (|| перенос сист. в пр-ве не меняет св-в системы)

з-н сохр. эн - однор. вр.

з-н сохр. мом. имп - изотр. пр-ва

для замкнутой физ. системы

∞ малый перенос системы $\longrightarrow$ инфинитозимальное преобразование

$\vec{r}_a \Rightarrow \vec{r}_a + \underbrace{\delta\vec{r}}$

беск. малое прираш., кот. получ. рад. вект. $\forall$ част. при || переносе

$$\psi(\vec{r}_1+\delta\vec{r}, \vec{r}_2+\delta\vec{r}, \dots) = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots) + \delta\vec{r}\sum_a \nabla_a \psi =$$

$$= (1+\delta\vec{r}\sum\nabla_a)\psi = \hat{O}\psi$$

$$\boxed{\hat{O} = 1 + \delta\vec{r}\sum_a \nabla_a}$$ опр-р переноса на беск. малое расст. $\delta\vec{r}$

Энергия не изменится при таком переносе $\Rightarrow \hat{O}\hat{H} - \hat{H}\hat{O} = 0$

опр-р такого переноса должен коммутир-ть с гамильтонианом

1, $\delta\vec{r} = \text{const}$ коммут-т с $\forall$ опр-м

$$\left(\sum_a \nabla_a\right)\hat{H} - \hat{H}\left(\sum_a \nabla_a\right) = 0 \qquad \boxed{\underbrace{C\sum_a \nabla_a}_{} = \hat{\vec{P}}} \qquad \boxed{\hat{\vec{p}} = C\nabla}$$

сохраняющаяся физ. вел-на

для 1 частицы

$\sum_a \nabla_a$ с точностью до const C есть сохр-ся величина

переход к класич. мех: $\Psi = a\cdot e^{\frac{i}{\hbar}S}$ $\quad \hat{\vec{p}}\Psi = C\nabla(a e^{\frac{i}{\hbar}S}) =$

пока что не будем дифф-ть амплит. a, кот. медленно меняется

$\vec{p}_{кл} = \frac{dS}{d\vec{r}} = \nabla S$?

$$= C\cdot a\frac{i}{\hbar}(\nabla S)e^{\frac{i}{\hbar}S} = C\cdot\frac{i}{\hbar}(\nabla S)\cdot\Psi \qquad C = -i\hbar \quad \boxed{\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla} \quad \Big\}\ \text{grad}\, S = p_{кл}$$

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\frac{d}{d\vec{r}} \qquad \hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x},\ \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y},\ \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

опр-р импульса - опр-р диф-я

$$S = \int p\,dq \qquad \frac{dS}{dq} = p$$

Нужно док-ть что это эрмитовский опр-р.

Эрмитовость оператора $\hat{\vec{p}}$:

есть две аналит. ф-ции $\lim\limits_{x\to\pm\infty}\psi(x) = \lim\limits_{x\to\pm\infty} \varphi(x) = 0$ $\int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx\, \varphi(x)\,\hat{p}_x\,\psi(x) =$

$$= -i\hbar \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx\, \varphi(x) \frac{d}{dx}\psi(x) = -i\hbar\, \underbrace{\varphi(x)\psi(x)\Big|_{-\infty}^{+\infty}}_{0} + i\hbar \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi(x) \frac{d}{dx}\varphi(x) = \underbrace{\int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi(x)\, \hat{p}_x^{*}\varphi(x)}_{\text{транспонир.}} =$$

$$= \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx\, \varphi(x)\, \hat{p}_x^{+}\, \psi(x) \qquad \boxed{\hat{p}_x^{+} = \hat{p}_x}$$

аналогично док-ся для $\hat{p}_y$, $\hat{p}_z$

Условие коммутации опер-ра импульса и опер. коорд.

дифф. по x и по y независимы $[\hat{p}_x, \hat{p}_y] = [\hat{p}_x, \hat{p}_z] = [\hat{p}_y, \hat{p}_z] = 0 \longrightarrow$

мы можем одновременно опред-ть все три составляющие импульса

$[y, \hat{p}_x] = 0$, $[z, \hat{p}_x] = 0$, $[x, \hat{p}_y] = 0$, $[x, \hat{p}_z] = 0$, $[y, \hat{p}_z] = 0$ $[z, \hat{p}_y] = 0$

$$[x, \hat{p}_x]\psi(x) = x\hat{p}_x\psi(x) - \hat{p}_x x\psi(x) = -i\hbar x\frac{d\psi}{dx} + i\hbar\frac{d}{dx}(x\psi) = \cancel{-i\hbar x\frac{d\psi}{dx}} +$$

$$+ \cancel{i\hbar x\frac{d\psi}{dx}} + i\hbar\psi = i\hbar\psi(x) \rightarrow \boxed{[x, \hat{p}_x] = i\hbar}$$

не коммутирует x и $\hat{p}_x$

аналогично, $[y, \hat{p}_y] = i\hbar$

$[z, \hat{p}_z] = i\hbar$

$$\boxed{[x_i, \hat{p}_k] = i\hbar\,\delta_{ik}} \qquad \boxed{[\vec{r}, \hat{\vec{p}}] = 3i\hbar}$$

$$\boxed{[f(\vec{r}), \hat{\vec{p}}] = i\hbar\frac{\partial f(\vec{r})}{\partial \vec{r}}}$$

Найдем собств. ф-ю опер-ра импульса:

$$\hat{\vec{p}}\,\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \overset{\text{собств. значение}}{\vec{p}}\,\psi_{\underset{\text{индекс состояния}}{\vec{p}}}(\vec{r})$$

$$-i\hbar\frac{d\psi_{\vec{p}}(\vec{r})}{d\vec{r}} = \vec{p}\,\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) \qquad \frac{d\psi_{\vec{p}}(\vec{r})}{\psi_{\vec{p}}(\vec{r})} = \frac{i}{\hbar}\vec{p}\,d\vec{r}, \qquad \boxed{\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = C e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}}$$

Вычислим нормировочную const: $\int d^3r\, \psi^{*}_{\vec{p}}(\vec{r})\,\psi_{\vec{p}'}(\vec{r}) = \delta(\vec{p} - \vec{p}')$

$$|c|^2\int d^3r\, e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}')\vec{r}} = \delta(\vec{p} - \vec{p}') \qquad |c|^2(2\pi\hbar)^3\,\delta(\vec{p} - \vec{p}') = \delta(\vec{p} - \vec{p}')$$

?

$$\delta(\vec p - \vec p') = \delta(p_x - p_x')\,\delta(p_y - p_y')\,\delta(p_z - p_z') \qquad C = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$$

$$\boxed{\psi_{\vec p}(\vec r) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec p \vec r\right)}$$ нормированная собств. ф-я опер-ра импульса

$$\psi^*_{\vec p'}(\vec r)\,\big\{\,\psi(\vec r) = \int d^3p\, a(\vec p)\psi_{\vec p}(\vec r) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int d^3p\, a(\vec p)\, e^{\frac{i}{\hbar}\vec p\cdot\vec r}$$

разложим

разложение в интегр. Фурье

$$\int d^3r\, \psi^*_{\vec p'}(\vec r)\psi(\vec r) = \int d^3p\, a(\vec p)\int d^3r\, \psi^*_{\vec p'}(\vec r)\psi_{\vec p}(\vec r) = a(\vec p')$$

$$\boxed{a(\vec p) = \int d^3r\, \psi^*_{\vec p}(\vec r)\psi(\vec r)}$$

$$a(\vec p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int d^3r\, e^{-\frac{i}{\hbar}\vec p\vec r}\psi(\vec r) \qquad dw_{\vec r} = |\psi(\vec r)|^2 d^3r, \quad (\vec r, \vec r + d\vec r)$$

$$dw_{\vec p} = |\psi(\vec p)|^2 d^3p, \quad (\vec p, \vec p + d\vec p)$$

28.02.12

получим выражение для опер-ра переноса на конечное расст-е a:

def. $\hat T_{\vec a}\psi(\vec r) = \psi(\vec r + \vec a) =$ ф-ции диф-е имеют со число произв-х

$= \psi(\vec r) + (\vec a\nabla)\psi(\vec r) + \frac{(\vec a\nabla)^2}{2!}\psi(\vec r) + \ldots =$ разложение ф-ции в ряд Тейлора

$\hat{\vec p} = -i\hbar\nabla$ $\qquad = \left[1 + \left(\frac{i}{\hbar}\vec a\hat{\vec p}\right) + \frac{1}{2!}\left(\frac{i}{\hbar}\vec a\hat{\vec p}\right)^2 + \ldots\right]\psi(\vec r) =$

$\nabla = \frac{i}{\hbar}\hat{\vec p}$ $\qquad = e^{\frac{i}{\hbar}\vec a\hat{\vec p}}\psi(\vec r)$ $\qquad \boxed{\hat T_{\vec a} = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\vec a\hat{\vec p}\right]}$

§ 6. Соотношение неопределенностей

Задача: пусть есть 2 опер-ра (эрмитовские) $\hat{F}^+ = \hat{F}$, $\hat{G}^+ = \hat{G}$ (они соотв-т физ. величинам)

$$[\hat{F}, \hat{G}] = i\hat{K} \qquad \hat{K}^+ = \hat{K}$$

коммутационное соотнош-е

$$\langle \hat{F} \rangle = \int dq\, \psi^* \hat{F} \psi, \quad \langle \hat{G} \rangle = \int dq\, \psi^* \hat{G} \psi, \quad \left.\begin{aligned} \hat{\Delta F} &= \hat{F} - \langle \hat{F} \rangle \\ \hat{\Delta G} &= \hat{G} - \langle \hat{G} \rangle \end{aligned}\right\} \text{введем нов. опер-ры}$$

$$[\hat{\Delta F}, \hat{\Delta G}] = i\hat{K}$$

$$I(\alpha) = \int dq \left| (\alpha \hat{\Delta F} - i \hat{\Delta G})\psi \right|^2 \geq 0 \qquad I(\alpha) = \int dq \left[(\alpha \hat{\Delta F} - i\hat{\Delta G})\psi \right] \left[(\alpha \hat{\Delta F}^* + i \hat{\Delta G}^*)\psi^* \right] =$$

трансп.

функционал – интеграл, зав. от пар-ра

$$= \int dq\, \psi^* (\alpha \widetilde{\hat{\Delta F}^*} + i \widetilde{\hat{\Delta G}^*})(\alpha \hat{\Delta F} - i \hat{\Delta G})\psi =$$

$\mathrm{Im}\,\alpha = 0$ α – действ. число

$$= \int dq\, \psi^* (\alpha \hat{\Delta F} + i \hat{\Delta G})(\alpha \hat{\Delta F} - i \hat{\Delta G})\psi = \int dq\, \psi^* \left(\alpha^2 (\hat{\Delta F})^2 + (\hat{\Delta G})^2 + \alpha \hat{K} \right) \psi =$$

$$= \alpha^2 \langle (\hat{\Delta F})^2 \rangle + \langle (\hat{\Delta G})^2 \rangle + \alpha \langle \hat{K} \rangle$$

найдем min функционала I: $I'(\alpha) = 2\alpha \langle (\hat{\Delta F})^2 \rangle + \langle \hat{K} \rangle = 0$ $\quad \alpha_0 = -\dfrac{\langle \hat{K} \rangle}{2 \langle (\hat{\Delta F})^2 \rangle}$

$I''(\alpha) = 2 \langle (\hat{\Delta F})^2 \rangle > 0$, значит α_0 – min

$$\frac{\langle \hat{K} \rangle^2 \langle (\hat{\Delta F})^2 \rangle}{4 \langle (\hat{\Delta F})^2 \rangle^2} + \langle (\hat{\Delta G})^2 \rangle - \frac{\langle \hat{K} \rangle^2}{2 \langle (\hat{\Delta F})^2 \rangle} \geq 0 \qquad -\frac{\langle \hat{K} \rangle^2}{4 \langle (\hat{\Delta F})^2 \rangle} + \langle (\hat{\Delta G})^2 \rangle \geq 0$$

$$\boxed{\langle (\hat{\Delta F})^2 \rangle \langle (\hat{\Delta G})^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \langle \hat{K} \rangle^2}$$

соотнош-е неопред-й для физ. величин F и G

для дисперсии физ. величин

$\delta x = \sqrt{\langle (\Delta x)^2 \rangle}$ – корни из дисперсии

$\delta p_x = \sqrt{\langle (\Delta \hat{p}_x)^2 \rangle}$

$$\hat{F} = x, \quad \hat{G} = \hat{p}_x \qquad [x, \hat{p}_x] = i\hbar \qquad \boxed{\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta \hat{p}_x)^2 \rangle \geq \frac{1}{4}\hbar^2}$$

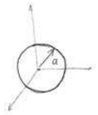
$$\delta x \cdot \delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

Оценим ср. зн. кин. эн. частицы, заключ. в V пр-ва с хар-м мин. разм. a

$\langle \Delta x\rangle = \langle \Delta\hat{p}_x\rangle = 0$ $\quad \langle(\Delta x)^2\rangle = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2 \approx a^2$? $\quad \Delta X = X - \langle X\rangle$

$\langle \Delta X\rangle = \langle X - \langle X\rangle\rangle = 0$

$\langle(\Delta\hat{p})^2\rangle = \langle p^2\rangle \qquad \langle p^2\rangle \geqslant \frac{\hbar^2}{4a^2}, \; \langle E_{кин}\rangle = \frac{\langle p^2\rangle}{2m} \geqslant \frac{\hbar^2}{8ma^2}$



m - масса, рассматр-й частицы

физ. вывод: чтобы заключ. част. в оч. малом V нужно затратить колос. энергию

1911г. Резерфорд ат. ядро

размер атома $R_{ат.} \approx 10^{-8}$ см, $m_e \approx 10^{-27}$ г $\quad \langle E_{кин}\rangle \approx \frac{10^{-54}}{8\cdot 10^{-27}\cdot 10^{-16}\cdot 1{,}6\cdot 10^{-12}} \approx 1$ эВ

чтобы запереть ē в ат. необх. не меньше 1 эВ

расм. ат. ядро $\quad$ <u>оценим энергию нуклона в ядре:</u>

$R_{яд} \approx 3\cdot 10^{-13}$ см, $m_N \approx 10^{-24}$ г, $\langle E_{кин}\rangle = \frac{10^{-54}}{8\cdot 10^{-24}\cdot 9\cdot 10^{-26}\cdot 1{,}6\cdot 10^{-6}} \approx 1$ МэВ

1000 МэВ
чтобы удержать ē в ядре (таких энергий нет)

<u>β-распад</u> Ферми:

ē и антинейтрино рожд. в мом-т распада

или e^+ и нейтрино

$dS = E\,dt - p_x dx - p_y dy - p_z dz \qquad \boxed{\delta E\cdot\delta t \geqslant \frac{\hbar}{2}}$ (из симметрии)

не ∃ опр. S, и времени t $\quad$ дисперсию вр. мы написать не можем

для того, чтобы измер. энергию с точн. δE необх. затр. вр. $\delta t \geqslant \frac{\hbar}{2\delta E}$

Гл. 3 Уравнение Шредингера

§1. Ур-е Шредингера

вид волн. ф-ции зав-т от вида начальн. системы из клас. мех. (следствие однор. и изотр. пр-ва и пр-па относ. Галилея):

$$E = \frac{p^2}{2m} \qquad \hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{\vec{p}}^2, \quad \hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla, \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$$ опер. Гамильтона для своб. част.

$$\hat{H} = \sum_a \hat{H}_a = -\frac{\hbar^2}{2}\sum_a \frac{1}{m_a}\Delta_a + U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots)$$

потенц. энергия взаимод., завис. от коорд-т

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r}), \qquad \boxed{i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U(\vec{r})\Psi}$$ ур-е Шредингера, 1926 г.

$$\boxed{\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + [E - U(\vec{r})]\Psi = 0}$$ ур-е Шред. для 1 част. во внешн. поле для стацион. сост.

$$\Delta\Psi + \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi = 0, \quad \underline{\Psi} = C\cdot\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r})\right]$$ плоская волна, реш-е этого ур-я

$$\omega = \frac{E}{\hbar}$$ - частота волны, $\vec{K} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$ - волн. в-р, $\lambda = \frac{1}{K} = \frac{\hbar}{p}$ - де-Бройлевская дл. волны (для своб. част)

бесконечная кратность вырождения по напр-м импульса (где $p \neq 0$, $E \neq 0$)

Переход к класс. механике, во что превратится ур-е Шредингера?

$$\Psi = a\cdot e^{\frac{i}{\hbar}S} \qquad i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U\cdot\Psi$$ будем диф-ть и S и a

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left(\frac{\partial a}{\partial t} + a\cdot\frac{i}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial t}\right)e^{\frac{i}{\hbar}S} \qquad \Delta\Psi = \nabla(\nabla\Psi) = \nabla\left((\nabla a) + a\cdot\frac{i}{\hbar}(\nabla S)\right)e^{\frac{i}{\hbar}S} =$$

$$= \left[(\Delta a) + \frac{2i}{\hbar}(\nabla a)(\nabla S) + \frac{i}{\hbar}a(\Delta S) - \frac{a}{\hbar^2}(\nabla S)^2\right]e^{\frac{i}{\hbar}S}$$

01.03.12

$$i\hbar\frac{\partial a}{\partial t} - a\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta a - \frac{i\hbar}{m}(\nabla a)(\nabla S) - \frac{i\hbar}{2m}a(\Delta S) + \frac{a}{2m}(\nabla S)^2 + Va$$

$$\underline{a\frac{\partial S}{\partial t}} - i\hbar\frac{\partial a}{\partial t} - \underline{\frac{\hbar^2}{2m}\Delta a} - \frac{i\hbar}{m}(\nabla a)(\nabla S) - \frac{i\hbar}{2m}a(\Delta S) + \underline{\frac{a}{2m}(\nabla S)^2} + \underline{Ua} = 0 \quad \Big| : a$$ a, S - действ-е

$$\frac{\partial S}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2ma}\Delta a + \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + U = 0 \qquad \frac{\partial a}{\partial t} + \frac{1}{m}(\nabla a)(\nabla S) + \frac{a}{2m}(\Delta S) = 0 \quad \Big\}\cdot 2a$$

$\hbar \to 0$ переход к клас. мех

$$\boxed{\frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + U + \frac{\partial S}{\partial t} = 0}$$

ур-е Гамильтона-Якоби (клас. ур-е)

$-\frac{\hbar^2}{2ma}\Delta a$ - малая квант поправка к ур-ю Г-Я.

$$\frac{\partial a^2}{\partial t} + \mathrm{div}\left(a^2 \frac{\nabla S}{m}\right) = 0, \quad \Psi = a e^{\frac{i}{\hbar}S}, \quad |\Psi|^2 = a^2 = \rho$$ плотность вер-ти

$\nabla S = \vec{p}$ в клас. мех.

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathrm{div}(\rho \vec{v}) = 0}$$

ур-е непр-ти для вероятности $\quad \frac{\nabla S}{m} = \vec{v}$

вероятн того, что част. нах. в объеме V

$$\int_{(V)} d^3r\, |\Psi|^2$$

$$\frac{d}{dt}\int_{(V)} d^3r\, |\Psi|^2 = \int_{(V)} d^3r\left(\frac{\partial \Psi}{\partial t}\Psi^* + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\Psi\right) = \frac{i}{\hbar}\int_{(V)} d^3r\left(\Psi \hat{H}^* \Psi^* - \Psi^* \hat{H}\Psi\right) =$$

V не вс пр-во

выражен в пр-ве об V доат. большой, но конечный

$$|\Psi|^2 = \Psi \cdot \Psi^* \qquad i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi, \quad \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Psi$$

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\hat{H}^*\Psi^*$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U$$ расс. 1 частицу $\quad \hat{H}$ - действ, U - действ

$$= \frac{i\hbar}{2m}\int_{(V)} d^3r\left(\Psi^*\Delta\Psi - \Psi\Delta\Psi^*\right) = \frac{i\hbar}{2m}\int_{(V)} d^3r\, \nabla\left(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*\right) = -\int_{(V)} d^3r\, \mathrm{div}\,\vec{j}$$

$$\boxed{\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi\nabla\Psi^* - \Psi^*\nabla\Psi\right)} \qquad \frac{d}{dt}\int_{(V)} d^3r\, |\Psi|^2 = -\oint d\vec{S}\cdot\vec{j} = -\int_{(V)} d^3r \cdot \mathrm{div}\,\vec{j}$$

по т. Гаусса

$\vec{j}$ - это плотность потока вер-ти

$$\int_{(V)} d^3r\left[\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2 + \mathrm{div}\,\vec{j}\right] = 0$$ в силу произв-ти об(V) $\Rightarrow$ $$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2 + \mathrm{div}\,\vec{j} = 0}$$

ур-е непр-ти для плотн-ти вер-ти и плотн. потока вер-ти

§ 2. Общие св-ва одномерного дв-я

одномерное дв-е → гамильтониан зав-т от 1 переменной

$U(x)$ - потенц. эн. зав-т только от x, $\Psi(\vec r) = \varphi(x)\cdot \chi(y,z)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec r) + [U(x)-E]\psi(\vec r) = 0$$ ур-е Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}\chi(y,z) - \frac{\hbar^2}{2m}\psi(x)\frac{\partial^2\chi(y,z)}{\partial y^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\psi(x)\cdot\frac{\partial^2\chi(y,z)}{\partial z^2} + [U(x)-E]\psi(x)\chi(y,z) = 0$$

$$\left.\begin{aligned}&\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[\mathcal{E}_1 - U(x)]\psi(x) = 0\\ &\frac{\partial^2\chi(y,z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\chi(y,z)}{\partial z^2} + \frac{2m\mathcal{E}_2}{\hbar^2}\chi(y,z) = 0\end{aligned}\right\}\quad E = \mathcal{E}_1 + \mathcal{E}_2$$

вдоль осей y, z част. совершает своб. дв-е (т.к. в это ур-е не вх. U)

$$\chi(y,z) = C\cdot\exp\left[\frac{i}{\hbar}(yp_y + zp_z)\right],\quad \mathcal{E}_2 = \frac{p_y^2 + p_z^2}{2m}$$

if $U(\vec r) = U_1(x) + U_2(y) + U_3(z)$ → зад. свод. к одном. дв-ю, ур. Шр. расп. на 3 ур.

Th В одномерном случае все ур-ни дискр. спектра не вырождены

(докажем от противного)

предположим, что уровень двукратно вырожден

одной и той же энерг. соотв. 2 волн. ф-ции $\Psi_1(x)$ и $\Psi_2(x)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi_1(x) = E\Psi_1(x) - U\Psi_1 \quad\Big|\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi_2(x) = E\Psi_2(x) - U(x)\Psi_2(x)$$

$$\frac{\Psi_1''(x)}{\Psi_1(x)} = \frac{2m}{\hbar^2}[U(x)-E] \qquad \frac{\Psi_2''(x)}{\Psi_2(x)} = \frac{2m}{\hbar^2}[U(x)-E] \qquad \frac{\Psi_1''(x)}{\Psi_1(x)} = \frac{\Psi_2''(x)}{\Psi_2(x)}$$

$$\Psi_1''\Psi_2 - \Psi_2''\Psi_1 = 0 \qquad \frac{d}{dx}(\Psi_1'\Psi_2 - \Psi_2'\Psi_1) = 0 \qquad \Psi_1'\Psi_2 - \Psi_2'\Psi_1 = C \ (\text{const})$$

дискретный спектр → финитное дв-е → волн. ф. д. обр. в 0 на $\pm\infty$

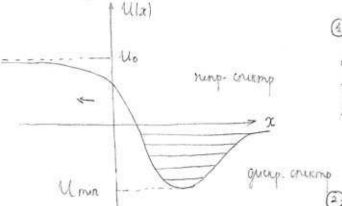
$\Psi_1(\pm\infty) = \Psi_2(\pm\infty) = 0$, поэтому $C = 0$ $\quad \dfrac{\Psi_1'}{\Psi_1} = \dfrac{\Psi_2'}{\Psi_2}$ еще раз интегрир-м ⇒

$\Psi_1(x) = \tilde C\,\Psi_2(x)$ это означ. что обе ф-ции совпадают → это сост-е не вырожд.

Th2: (осцилляционная теор.) $E_n > E_{n-1} > \dots > E_1$

для волн-х ф-й дискр. спектра $\Psi_n(x)$, $n=1,2,3,\dots$
волн. ф-я обращ. в ноль $(n-1)$ раз   в осн. сост. не обращ. в 0 (не учит. узлов)
в 1 возб. сост. 1 раз

рассмотрим общий потенциал $U(x)$!



① $U_{min} < E < 0$ дискр. спектр
очевидно, что в эт. обл-ти дв-е финитно, част. не может уйти на $+\infty$
все сост. дискр. спектра не вырождены (по Th)

② $0 < E < U_0$ спектр непр. частица может уйти на $+\infty$. Посмотр. реш-е ур. Шр. в эт. обл.

$\psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0$, $x \to +\infty$ (пот. эн. обращ. в 0)

sin, cos - стоячие волны
экспоненты - это бегущие волны

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

$\psi(x) = a_1 \overset{\rightarrow}{e^{ikx}} + a_2 \overset{\leftarrow}{e^{-ikx}}$, $x \to +\infty$ a_1, a_2 - комплексные

плотность потока вер-ти имеет напр-е. Вычислим его, чтобы опред-ть куда движется частица (плоская волна)

$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi)$ $\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m}\left(e^{ikx}(-ik)e^{-ikx}\frac{\vec{x}}{x} - e^{-ikx}ike^{ikx}\frac{\vec{x}}{x}\right) = \frac{i\hbar}{2m}2(-ik)\frac{\vec{x}}{x} = \frac{\hbar k}{m}\frac{\vec{x}}{x}$

$\vec{j} = v\frac{\vec{x}}{x}$ первая волна движ. слева направо, втор. волна движ. справа налево

$x \to -\infty$ попадаем под барьер $U > E$ k - мнимая

$\psi'' - \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)\psi = 0$ реш-е: $\psi(x) = be^{\varkappa x}$ $\varkappa = \frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}$

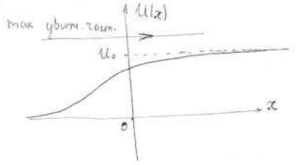
$x<0$ волнов. ф-я под барьером затухает экспоненциально
част. может проникнуть под барьер   спектр непр → все сост. невырождены (достаточно чтобы волн. ф. обращ. в ноль на одной из бесконечностей)

③ $\psi(x)$ $E > U_0$

$\psi(x) = a_1e^{ikx} + a_2e^{-ikx}$, $x \to +\infty$

$\psi(x) = \alpha_1 e^{i\varkappa' x} + \alpha_2 e^{-i\varkappa' x}$ $x \to -\infty$ $\varkappa' = \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}$

§3. Коэф. прохождения



источник частиц нах. на $-\infty$
некот. пройдут через барьер, некот. отразятся

$E > U_0$ част. движ. в поле пот. барьера

$$\psi(x) = A_1 \cdot e^{ikx} + A_2 \cdot e^{-ikx}, \quad x \to -\infty$$

$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ возможно надбарьерное отражение

$$|\vec{j}_{пад}| = \frac{\hbar k}{m}|A_1|^2, \quad |\vec{j}_{отр}| = \frac{\hbar k}{m} \cdot |A_2|^2$$

$$\psi(x) = C \cdot e^{i\varkappa x}, \quad x \to +\infty, \quad \varkappa = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}$$

есть только прошедшая волна

$$|\vec{j}_{прош}| = \frac{\hbar \varkappa}{m}|C|^2$$

коэф. отраж.

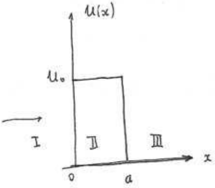
коэф. прохожд. $D = \frac{|\vec{j}_{прош}|}{|\vec{j}_{пад}|} = \frac{\varkappa}{k}\left|\frac{C}{A_1}\right|^2$, $\quad R = \frac{|\vec{j}_{отраж}|}{|\vec{j}_{пад}|} = \left|\frac{A_2}{A_1}\right|^2$

нет поглощения частиц и нет рожд. частиц $\Rightarrow$ аналит. вер-ти непр-на
плотн. пот. вер. непр. везде

$$\boxed{D + R = 1}$$

06.03.12.

§4 Задача о прохождении прямоугольного барьера



$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0,\ x > a \\ U_0, & 0 \le x \le a \end{cases}$$

$$\left\{\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(x)]\right\}\psi(x) = 0$$ Необх. реш. одномерное ур-е Шредингера

$E > U_0$

Источник частиц нах. на $-\infty$

I: $\psi_I(x) = \underbrace{A_1 \cdot e^{ikx}}_{\text{слева направо}} + \underbrace{A_2 \cdot e^{-ikx}}_{\text{справа налево}}, \quad x < 0 \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

II. $\psi_{II}(x) = B_1 \cdot e^{i\varkappa x} + B_2 \cdot e^{-i\varkappa x}, \quad 0 \le x \le a,$ есть отраженная волна (кв. мех)

$$\varkappa = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}$$

III. $\psi_{III}(x) = C e^{ikx}, \quad x > a$ нет отраженной волны

Нет источ. частиц и поглощ. частиц ⇒ волн. ф-я и перв. произв. непр-ны

(1) $A_1 + A_2 = B_1 + B_2$ в т. $x=0$ приравняем волн. ф-ции

(2) $A_1 - A_2 = \frac{\varkappa}{k}(B_1 - B_2)$ произв. в т. $x=0$

(3) $\cancel{A_1 \cdot e^{ika} + A_2 \cdot e^{-ika}} = B_1 \cdot e^{i\varkappa a} + B_2 e^{-i\varkappa a} = C \cdot e^{ika}$ в т. $x=a$

(4) $\cancel{A_1 e^{ika} - A_2 e^{-ika}} = \frac{\varkappa}{k}(B_1 e^{i\varkappa a} - B_2 e^{-i\varkappa a}) = C e^{ika}$ произв. в т. $x=a$

коэф. прохожд. $D = \left|\frac{C}{A_1}\right|^2$

$\frac{(1)+(2)}{2}$:

$$A_1 = \frac{1}{2}\left[\left(1 + \frac{\varkappa}{k}\right)B_1 + \left(1 - \frac{\varkappa}{k}\right)B_2\right]$$

$\frac{(3)+(4)}{2}$

$$B_1 = \frac{C}{2} e^{-i\varkappa a}\left[1 + \frac{k}{\varkappa}\right]e^{ika},$$

$$B_2 = \frac{C}{2} e^{i\varkappa a}\left[1 - \frac{k}{\varkappa}\right]e^{ika}$$

$$A_1 = \frac{C}{4} e^{ika}\left[\left(1 + \frac{\varkappa}{k}\right)\left(1 + \frac{k}{\varkappa}\right)e^{-i\varkappa a} + \left(1 - \frac{\varkappa}{k}\right)\left(1 - \frac{k}{\varkappa}\right)e^{i\varkappa a}\right]$$

$$D = \frac{16}{\left|\left(1 + \frac{\varkappa}{k}\right)\left(1 + \frac{k}{\varkappa}\right)e^{-i\varkappa a} + \left(1 - \frac{\varkappa}{k}\right)\left(1 - \frac{k}{\varkappa}\right)e^{i\varkappa a}\right|^2} =$$

$$= \frac{16 k^2 \varkappa^2}{\left|(k+\varkappa)^2 - (k-\varkappa)^2 e^{2i\varkappa a}\right|^2} = \frac{16 k^2 \varkappa^2}{(k+\varkappa)^4 + (k-\varkappa)^4 - 2(k+\varkappa)^2(k-\varkappa)^2 \cos 2\varkappa a} =$$

$$= \frac{8\cancel{16} k^2 \varkappa^2}{\cancel{2}k^4 + \cancel{4}k^3\varkappa + \overset{6}{\cancel{12}} k^2\varkappa^2 + \overset{2}{\cancel{4}} k\varkappa^3 + \overset{2}{\cancel{2}}\varkappa^4 + \cancel{k^4} - 4\cancel{k^3\varkappa} + 6\cancel{k^2\varkappa^2} - 4\cancel{k\varkappa^3} + \cancel{\varkappa^4} - \cancel{2}(k^2-\varkappa^2)^2 + \overset{2}{\cancel{4}}(k^2-\varkappa^2)^2 \sin^2\varkappa a}$$

$$\cos 2\varkappa a = \cos^2\varkappa a - \sin^2\varkappa a = 1 - 2\sin^2\varkappa a$$

$$\frac{8k^2\varkappa^2}{k^4 + 6k^2\varkappa^2 + \varkappa^4 - k^4 + 2k^2\varkappa^2 - \varkappa^4 + 2(k^2-\varkappa^2)^2 \sin^2\varkappa a} = \frac{1}{1 + \left[\frac{(k^2-\varkappa^2)\sin\varkappa a}{2k\varkappa}\right]^2}$$

$$\boxed{D = \frac{1}{1 + \left[\frac{(k^2-\varkappa^2)\sin\varkappa a}{2k\varkappa}\right]^2}}$$

коэф. прохождения $D \leq 1$

Когда $\underline{D = 1}$,

$\sin \varkappa_n a = 0$ if $\varkappa_n = \frac{\pi n}{a}$, $n = 1; 2; 3$

$$\varkappa_n = \frac{\sqrt{2m(E_n - U_0)}}{\hbar} = \frac{\pi n}{a}$$

$$\boxed{E_n = \frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{2 m a^2} + U_0}$$

при таких знач-х E_n коэф. прох = 1
(барьер прозрачен для частицы)
коэф. отраж. = 0

$\underline{\underline{E < U_0}}$

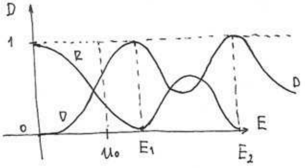
$$\varkappa = \frac{\sqrt{2m(\cancel{E_0} - \cancel{E})}}{\hbar} = i\varkappa', \quad \varkappa' = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} \qquad \sin \varkappa a = \sin i\varkappa' a =$$

$\sin \varkappa a = \sin i\varkappa' a = i \cdot \operatorname{sh} \varkappa' a$

$$D = \frac{1}{1 + \left[\frac{(k^2+\varkappa'^2)\operatorname{sh}\varkappa' a}{2k\varkappa'}\right]^2}$$

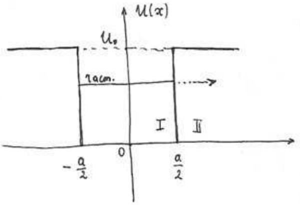
Энергия ниже выс. барьера, а коэф. проход $\neq 0$

туннельный эффект



$R = 1 - D$ в области барьера нельзя говорить о длине волны частицы

§5 Частица в прямоуг. потенц. яме



$$U(x) = \begin{cases} U_0, & x < -\frac{a}{2} \\ & x > \frac{a}{2} \\ 0, & -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \end{cases}$$

$E < U_0$ частица нах. в яме

дискретный спектр энергий в яме, над ямой непр. спектр

симметрия задачи:

при $\underbrace{\text{замене } x \text{ на } -x}_{\text{инверсия}}$ потенц. эн. не меняется, гамильт. тоже не будет меняться

$\psi(-x) = \gamma \cdot \psi(x)$ инверсия

$\gamma = +1$ реш. я ур. Шр. наз. четными

$\psi(x) = \gamma^2 \psi(x)$, $\gamma^2 = 1$, $\gamma = \pm 1$

$\gamma = -1$ реш. я нечетные

достаточно рассмотреть 2 области

бегущие волны - exp стоячие волны sin, cos

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2\right)\psi_{I}(x) = 0 \quad \psi_{I}^{(+)}(x) = A \cdot \cos kx, \quad \left(\frac{d^2}{dx^2} - \varkappa'^2\right)\psi_{II}(x) = 0, \ \psi_{II}(x) = B e^{-\varkappa' x}$$

решение с положит. четностью $(\gamma = +1)$

гран. усл. волн. ф-я должна exp-но затухать в подбарьерн. область (при дискр. спектре част. не может уходить на ∞)

(1) $A\cdot\cos\frac{ka}{2} = B\cdot e^{-\frac{\varkappa' a}{2}}$ условие сшивки первых произв-х

(2) $A\cdot\sin\frac{ka}{2} = \frac{\varkappa'}{k}\cdot B e^{-\frac{\varkappa' a}{2}}$

$\frac{(2)}{(1)} \Rightarrow \boxed{\operatorname{tg}\frac{ka}{2} = \frac{\varkappa'}{k}}$ условие сшивки логарифмических производных

трансцендентное ур-е

$$\operatorname{tg}\frac{ka}{2} = \sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2k^2} - 1}$$

$$\varkappa' = \frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}$$

$$\frac{ka}{2} = \operatorname{arctg}\sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2k^2}-1} + l\pi \ominus \quad l = 0,1,2,..$$

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

$$1+\operatorname{tg}^2\alpha = \frac{1}{\cos^2\alpha} \quad \cos^2\alpha = \frac{\hbar^2k^2}{2mU_0}, \quad \cos\alpha = \frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}}$$

$$\operatorname{arctg}\sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2k^2}-1} = \alpha$$

$$\ominus \arccos\frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}} + l\pi = l\pi + \frac{\pi}{2} - \arcsin\frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}} = \frac{\pi}{2}(2l+1) - \arcsin\frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}} =$$

$2l+1 = n \quad n = 1,3,5,..$

$$= \frac{n\pi}{2} - \arcsin\frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}}$$

$$k_n a = \pi n - 2\arcsin\frac{\hbar k_n}{\sqrt{2mU_0}}$$

усл. сшивки в т. $x = \frac{a}{2}$ $\quad E_n^{(+)} = \frac{\hbar^2k_n^2}{2m}$

$\underline{n = 1,3,5}$

$U_0 \to \infty$ беск. глубокая яма $\quad k_n = \frac{\pi n}{a}, \quad E_n^{(+)} = \frac{\pi^2n^2\hbar^2}{2ma^2} \quad \psi_I^{(+)} = \sqrt{\frac{2}{a}}\cos\frac{\pi n}{a}x$

$n=1$

$$\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dx\,|\psi_I^{(+)}(x)|^2 = 1$$

перейдем к состоянию отриц. четности: $\psi_I^{(-)}(x) = C\cdot\sin kx, \quad \psi_{II}(x) = B\cdot e^{-\varkappa' x}$

$\operatorname{ctg}\frac{ka}{2} = -\frac{\varkappa'}{k}$ усл. сшивки, $\frac{ka}{2} = l\pi - \operatorname{arctg}\sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2k^2}-1} = \quad l = 1,2,3,...$

0 невозможен

$= l\pi - \arcsin\frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}}, \quad n = 2l, \ \underline{n = 2,4,6,..}$

$$k_n a = \pi n - 2\arcsin\frac{\hbar k_n}{\sqrt{2mU_0}} \qquad E_n^{(-)} = \frac{\hbar^2k_n^2}{2m}$$

беск. глуб. яма:

$$k_n = \frac{\pi n}{a} \quad n = 2, 4, 6, \ldots \quad E_n^{(-)} = \frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad \psi_I^{(-)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin \frac{\pi n}{a} x$$

13.03.12.

$$ka = n\pi - 2 \arcsin \frac{k\hbar}{\sqrt{2mU_0}}$$ будем рассм. это рав-во как ф-ю k

$$k \leqslant \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar}, \quad k_{max} = \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar} \quad k_{max}\, a \geqslant \pi(n-1)$$

в прямоуг. яме, какой бы мелкой она ни была, всегда есть хотя бы 1 уровень

$$\Psi_I(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \cos \frac{n\pi x}{a}, & n = 1, 3, 5, \ldots \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin \frac{n\pi x}{a}, & n = 2, 4, 6, \ldots \end{cases}$$ ∞ глуб. яма

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2} \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$ энрг. в ∞ глуб. прямоуг. яме

3-х мерн. яма: $U(x, y, z) = U_1(x) + U_2(y) + U_3(z)$

$$U_1(x) = \begin{cases} 0, & -\frac{a}{2} \leqslant x \leqslant \frac{a}{2} \\ \infty, & x < -\frac{a}{2},\ x > \frac{a}{2} \end{cases}$$

$$\Psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) = \Psi_{n_1}(x)\Psi_{n_2}(y)\Psi_{n_3}(z)$$

$$U_2(y) = \begin{cases} 0, & -\frac{b}{2} \leqslant y \leqslant \frac{b}{2} \\ \infty, & y < -\frac{b}{2},\ y > \frac{b}{2} \end{cases}$$

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2}\right)$$

if $a \neq b \neq c$, то состояния энергий невырождены

$$U_3(z) = \begin{cases} 0, & -\frac{c}{2} \leqslant z \leqslant \frac{c}{2} \\ \infty, & z < -\frac{c}{2},\ z > \frac{c}{2} \end{cases}$$

случай $a = b = c$ $$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$$

сост. част. в яме опред-ся тремя квант. числами

Пример: $\{5, 1, 1\}$, $\{1, 5, 1\}$, $\{1, 1, 5\}$

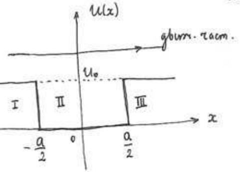
возникает вырождение волн. ф-ции разные, а энрг. одинак. (вырождение связано с симмет. ямы)

$\{3, 3, 3\}$ - случайное вырождение (не связано с симметр. ямы)

билет: „Прямоуг. яма. $E < U_0$"
билет: „ –||– . $E > U_0$"

1 § на 2 билета

$E > U_0$



источник частиц на $-\infty$

Нет симметр. так как есть напр. дв-я част. движ. над ямой. Реш-е лучше искать в виде бегущих волн.

отрат. от ямы частицы

в I обл: $\Psi_I(x) = A_1 \cdot e^{i\varkappa x} + A_2 \cdot e^{-i\varkappa x}$, $\varkappa = \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}$

II обл: $\Psi_{II}(x) = B_1 \cdot e^{ikx} + B_2 \cdot e^{-ikx}$, $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

III обл: $\Psi_{III}(x) = C e^{i\varkappa x}$

$$\left.\begin{aligned} A_1 e^{-\frac{i\varkappa a}{2}} + A_2 e^{\frac{i\varkappa a}{2}} &= B_1 e^{-\frac{ika}{2}} + B_2 \cdot e^{\frac{ika}{2}} \\ A_1 e^{-\frac{i\varkappa a}{2}} - A_2 \cdot e^{\frac{i\varkappa a}{2}} &= \frac{k}{\varkappa}\left[B_1 e^{-\frac{ika}{2}} - B_2 \cdot e^{\frac{ika}{2}} \right] \end{aligned}\right\} \text{ в т. } -\frac{a}{2}$$

$$\left.\begin{aligned} B_1 e^{\frac{ika}{2}} + B_2 \cdot e^{-\frac{ika}{2}} &= C e^{\frac{i\varkappa a}{2}} \\ B_1 e^{\frac{ika}{2}} - B_2 e^{-\frac{ika}{2}} &= \frac{\varkappa}{k} C e^{\frac{i\varkappa a}{2}} \end{aligned}\right\} \text{ в т. } \frac{a}{2}$$

$$D = \frac{1}{1 + \left[\frac{(k^2 - \varkappa^2)\sin ka}{2k\varkappa}\right]^2}$$

$\boxed{E = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}} > U_0$ $\quad \frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{2m a^2} > U_0$

$n > \frac{\sqrt{2mU_0}\, a}{\pi\hbar}$

$D = 1$, $k_n a = n\pi$ $\quad k_n = \frac{n\pi}{a}$ $\quad E > U_0$, $E_n > U_0$

резонансные энергии (при $\underline{D = 1}$) или виртуальные уровни энергии (подобны уровням в яме)

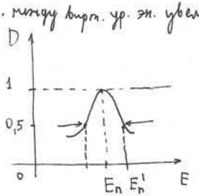
разность между ближайшими ур. энергии

$E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(2n+1)$ при возраст. $n\uparrow$ расст. между вирт. ур. эн. увелич-ся

вблизи т $D = 1$ как себя ведет коэф. прохожд.

резонансная кривая

$E_n' - E_n = \Delta E_n$ полуширина резонансного ур-ня энергии



Полуширина резонанса:

предположим $k_n' = k_n + q$ $\qquad \frac{1}{2} = \dfrac{1}{1 + \left[\dfrac{(k_n+q)^2 - \varkappa^2}{2(k_n+q)\varkappa}\right]^2 \sin^2(k_n+q)a}$

$|\sin(k_n+q)a| = |\sin(k_n a + qa)| = \quad \{ qa \ll 1, \quad q$ - малая величина $\}$

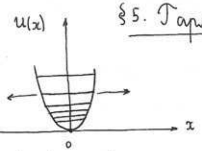
$= |\sin qa| = |q|a \qquad \left[\dfrac{k_n^2 - \varkappa^2}{2k_n\varkappa} qa\right]^2 = 1 \qquad |q|a = \dfrac{2k_n\varkappa}{|k_n^2 - \varkappa^2|}, \quad |q| = \dfrac{2k_n\varkappa}{a|k_n^2 - \varkappa^2|}$

$$\Delta E_n = E_n' - E_n = \frac{\hbar^2 \cdot k_n'^2}{2m} - \frac{\hbar^2 \cdot k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\underbrace{(k_n'^2 - k_n^2)}_{\text{до линейных членов по } q} = \frac{\hbar^2}{2m} 2k_n|q| = \frac{\hbar^2 k_n |q|}{m}$$

$\boxed{\Delta E_n = \dfrac{2\hbar^2 k_n^2 \varkappa}{ma|k_n^2 - \varkappa^2|}}$ - полуширина виртуального уровня (резонанса)

---

§5. Гармонический осциллятор



перевернутый колокол

потенц. эн. имеет min

$$U(x) = U(0) + x \cdot U'(0) + \frac{x^2}{2} U''(0) + \ldots$$

при выбранной СК $U(0) = 0$, $U'(0) = 0$ $\quad U(x) = \frac{1}{2} \left.\dfrac{\partial^2 U(x)}{\partial x^2}\right|_{x=0} \cdot x^2$,

$K = \left.\dfrac{\partial^2 U(x)}{\partial x^2}\right|_{x=0} > 0$, поскольку min.

$H_{кл} = \dfrac{p^2}{2m} + \dfrac{Kx^2}{2}$ классич. ф-я Гамильтона $\quad \dot p = -\dfrac{\partial H_{кл}}{\partial q}, \quad \dot q = \dfrac{\partial H_{кл}}{\partial p} \quad | \; q = x |$

$\ddot x + \frac{k}{m} x = 0$ ур-е для класс. осцил. $\qquad \dot p = -kx, \quad \dot q = \dfrac{p}{m} \quad \dot x = \dfrac{p}{m}$

$\boxed{m\ddot x + kx = 0} \quad \omega^2 = \dfrac{k}{m} \quad \ddot x + \omega^2 x = 0 \qquad \ddot x = \dfrac{\dot p}{m} = -\dfrac{k}{m} x$

$x(t) = A \cdot \cos(\omega t + \beta)$ удобно решать в виде стоячих волн

$$\langle x^2(t) \rangle_{кл} = \frac{1}{T}\int_0^T dt\, x^2(t) = \frac{1}{T} A^2 \cdot \underbrace{\int_0^T dT \cos^2(\omega t + \beta)}_{\frac{T}{2}} = \frac{1}{2} A^2$$

период класич. движения $T = \dfrac{2\pi}{\omega}$

переход к квант. задаче $\rightarrow$ заменяем физ величины опер-ми $p \to \hat p = -i\hbar \dfrac{d}{dx}$

$x \to \hat x = x$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{kx^2}{2} \qquad \left[\frac{d^2}{dx^2} - \frac{m^2\omega^2 x^2}{\hbar^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\right]\psi(x) = 0$$

перейдем к безразмерной переменной $x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\,\xi$, $\boxed{E = \frac{\hbar\omega}{2}\varepsilon}$

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2 + \varepsilon\right)\psi(\xi) = 0$$

волн. ф-я должна быстро затухать (в подбарьерной обл-ти)

$$\boxed{\psi(\xi) = C\,v(\xi)\,e^{-\frac{\xi^2}{2}}}$$

$$\psi'(\xi) = C(v' - \xi v)\,e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

$$\psi''(\xi) = C(v'' - v - \xi v' - \xi v' + \xi^2 v)\,e^{-\frac{\xi^2}{2}} = C(v'' - 2\xi v' + (\xi^2 - 1)v)\,e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

$$v''(\xi) - 2\xi v'(\xi) - v(\xi) + \varepsilon v = 0$$

$$v''(\xi) - 2\xi v'(\xi) + (\varepsilon - 1)v(\xi) = 0$$

$v(\xi)$ - д.б. полином конечной степ. от ξ

реш-я $\exists$ при усл. $\varepsilon = 2n+1$, где $n = 0, 1, 2, \dots$

полиномы Эрмита (Hermit)

$$\boxed{H_n(\xi) = (-1)^n \cdot e^{\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}e^{-\xi^2}}$$

мы проквантовали задачу

кв. число n - главное кв. число

$\boxed{E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)}$ - энергия гармон. осцил.

$\boxed{\Psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} \cdot e^{-\frac{\xi}{2}} H_n(\xi)}$ — волнов. ф-я гармонич. осцил.

вырождение отсутствует

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, \Psi_n^*(\xi)\Psi_m(\xi) = \delta_{nm}$$

$E_n = \frac{1}{2}\hbar\omega$ когда $n = 0$ энергия нулевых колебаний

$$\boxed{E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega}$$

15.03.12. $H_0(\xi) = 1$, $H_1(\xi) = 2\xi$, $H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2$, $H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi$

Четность полинома $(-1)^n$ полин. Эрм. с неч. ном - неч. ф-ции

с четн. ном - четн. ф.

$\Psi_n(-\xi) = (-1)^n \Psi_n(\xi)$

$H_0(\xi)$ не обращ. в 0 нигде не имеет узлов

$H_1(\xi)$ - 1 узел ($\xi = 0$)

$H_2(\xi)$ - 2 узла (

$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ - энергия нулевых колеб.

$$\langle x\rangle_n = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \Psi_n^*(x)\, x\, \Psi_n(x) = 0 \qquad \langle \hat p_x\rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \Psi_n^*(x) \frac{d}{dx}\Psi_n(x) = 0$$

x - неч. ф-я $\Psi_n(x)$ - либо чет, либо неч $\frac{d}{dx}$ - неч.

$$\langle(\Delta x)^2\rangle = \langle x^2\rangle - \overset{0}{\langle x\rangle^2} = \langle x^2\rangle$$
$$\langle(\Delta \hat p_x)^2\rangle = \langle \hat p_x^2\rangle - \overset{0}{\langle \hat p_x\rangle^2} = \langle \hat p_x^2\rangle$$

Чтобы выч. дисперсии, необх. найти $\langle x^2\rangle$ и $\langle \hat p_x^2\rangle$

одномерн. зад. есть только $\hat p_x$

$$\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta \hat p_x)^2\rangle \geqslant \frac{\hbar^2}{4}, \qquad \langle x^2\rangle\langle \hat p_x^2\rangle \geqslant \frac{\hbar^2}{4} \qquad E = \langle \hat H\rangle = \frac{\langle p^2\rangle}{2m} + \frac{m\omega^2\langle x^2\rangle}{2}$$

$$E \geqslant \frac{\hbar^2}{8m\langle x^2\rangle} + \frac{m\omega^2\langle x^2\rangle}{2} \qquad \frac{\partial E}{\partial\langle x^2\rangle} = -\frac{\hbar^2}{8m\langle x^2\rangle^2} + \frac{m\omega^2}{2} = 0$$ чтобы найти min

$$\langle x^2\rangle_{min} = \frac{\hbar}{2m\omega}, \qquad \boxed{E \geqslant E_{min} = \frac{1}{2}\hbar\omega}$$

min энергия, допускаемая соотнош. неопределенностей - это есть эн. нулевых колеб.

Проверить экспериментально:

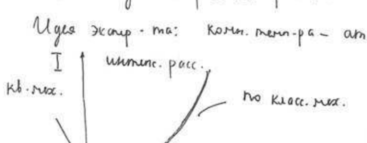
кристал. тела → кристал. решетка   фонон - квант колебания

рассеив. част. на крист. вещ-ве + расс. на атомах в узлах реш. и на фононах

можно выдел. эн. расс. на фононах.

Идея экспер-та: комн. темп-ра - ат. колебл. в узл. реш., приближ. к абс. нулю ⇒

(нулевых колеб. д. не должно)



нулев. колеб. - физ. реальность в квант. сред

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi)$$

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\,\xi \qquad \langle(\Delta\xi)^2\rangle_n = \langle\xi^2\rangle_n = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi\, \Psi_n^*(\xi)\,\xi^2\,\Psi_n(\xi)$$

рекурр. соотн. $\xi H_n(\xi) = n H_{n-1}(\xi) + \frac{1}{2}H_{n+1}(\xi)$ $\boxed{\xi\Psi_n(\xi) = \sqrt{\frac{n}{2}}\,\Psi_{n-1}(\xi) + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\,\Psi_{n+1}(\xi)}$

рекур. соотн. для в.ф. гармонич. осцил.

$$\xi^2\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{n}{2}}\,\xi\Psi_{n-1}(\xi) + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\,\xi\Psi_{n+1}(\xi) = \frac{1}{2}\sqrt{n(n-1)}\,\Psi_{n-2}(\xi) + \underline{(n+\tfrac{1}{2})\Psi_n(\xi)} + \frac{1}{2}\sqrt{(n+1)(n+2)}\,\Psi_{n+2}(\xi)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, \Psi_n^*(\xi)\Psi_n(\xi) = \delta_{nm} \qquad x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\,\xi$$

$$\langle(\Delta\xi)^2\rangle_n = \langle\xi^2\rangle_n = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, \Psi_n^*(\xi)\,\xi^2\Psi_n(\xi) = n+\frac{1}{2} \qquad \langle(\Delta x)^2\rangle_n = \langle x^2\rangle_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar}{m\omega}$$

$$\langle x^2\rangle_0 = \frac{\hbar}{2m\omega}, \qquad E_0 = m\omega^2\langle x^2\rangle_0$$

для ср. величин все остается так же, как и в класс. мех.

Вычислим матр. элементы для x:

$$x_{mn} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi\, \Psi_n^*(\xi)\, x\, \Psi_n(\xi) = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, \Psi_n^*(\xi)\,\xi\,\Psi_n(\xi) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n}\,\delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+1}\right)$$

отличны от нуля только не диаг. матр. эл.

$$x_{n-1,n} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \qquad x_{n,n+1} = \sqrt{\frac{\hbar(n+1)}{2m\omega}}$$

Еще одно рекур. соотн. для H: $\dfrac{dH_n(\xi)}{d\xi} = 2nH_{n-1}(\xi)$, $\boxed{\dfrac{\partial\Psi_n(\xi)}{\partial\xi} = 2\sqrt{\dfrac{n}{2}}\,\Psi_{n-1}(\xi) - \xi\Psi_n(\xi)} =$

$$= \sqrt{\frac{n}{2}}\,\Psi_{n-1}(\xi) - \sqrt{\frac{n+1}{2}}\,\Psi_{n+1}(\xi)$$

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} = -i\sqrt{m\hbar\omega}\,\frac{\partial}{\partial\xi} = \hat{p}_\xi\left(\sqrt{m\hbar\omega}\right)$$

$$\left(\tfrac{1}{2}\right)\cdot\Bigg|+\ \begin{cases} \dfrac{\partial}{\partial\xi}\Psi_n(\xi) = \sqrt{\dfrac{n}{2}}\,\Psi_{n-1}(\xi) - \sqrt{\dfrac{n+1}{2}}\,\Psi_{n+1}(\xi) \\ \xi\Psi_n(\xi) = \sqrt{\dfrac{n}{2}}\,\Psi_{n-1}(\xi) + \sqrt{\dfrac{n+1}{2}}\,\Psi_{n+1}(\xi) \end{cases}$$

$$\hat{p}_\xi = -i\frac{\partial}{\partial\xi}$$

$$\hat{p}_x = \sqrt{m\hbar\omega}\,\hat{p}_\xi$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{\partial}{\partial\xi}\right)\Psi_n = \sqrt{n}\,\Psi_{n-1}(\xi)$$

$$\frac{\partial}{\partial\xi} = i\hat{p}_\xi$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{\partial}{\partial\xi}\right)\Psi_n(\xi) = \sqrt{n+1}\,\Psi_{n+1}(\xi)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + i\hat{p}_\xi\right)\Psi_n(\xi) = \sqrt{n}\,\Psi_{n-1}(\xi),$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - i\hat{p}_\xi\right)\Psi_n(\xi) = \sqrt{n+1}\,\Psi_{n+1}(\xi),$$

введем операторы:

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi + i\hat{p}_\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{\partial}{\partial\xi}\right), \quad \hat{a}\Psi_n(\xi) = \sqrt{n}\,\Psi_{n-1}(\xi)$$

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi - i\hat{p}_\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{\partial}{\partial\xi}\right), \quad \hat{a}^+\Psi_n(\xi) = \sqrt{n+1}\,\Psi_{n+1}(\xi)$$

$\hat a \Psi_0(\xi) = 0 \qquad \left(\xi + \frac{\partial}{\partial \xi}\right)\Psi_0(\xi) = 0 \qquad \Psi_0(\xi) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{\xi^2}{2}}$, нормир. волн. ф-я

$$\boxed{\Psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat a^+)^n \Psi_0(\xi)}$$

$$H_{кл.} = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

$\Psi_n^*(\xi)\cdot$ $-\begin{cases} \hat a \hat a^+ \Psi_n(\xi) = (n+1)\Psi_n(\xi) \\ \hat a^+ \hat a \Psi_n(\xi) = n\Psi_n(\xi) \end{cases}$

$$\hat H = \frac{\hbar\omega}{2}(\xi^2 + \hat p_\xi^2) = \hbar\omega\left(\hat a^+ \hat a + \frac{1}{2}\right)$$

$$(\hat a \hat a^+ - \hat a^+ \hat a)\Psi_n(\xi) = \Psi_n(\xi)$$

$$\xi^2 + \hat p_\xi^2 = \hat a \hat a^+ + \hat a^+ \hat a$$

$$\boxed{[\hat a, \hat a^+] = 1}$$

$$\hat a \hat a^+ = 1 + \hat a^+ \hat a$$

$$(\hat a \hat a^+)_{nm} = n+1 \qquad (\hat a \hat a^+)_{mn} = (n+1)\delta_{mn} \qquad (\hat a^+ \hat a)_{mn} = n\delta_{mn}$$

$$(\hat H)_{mn} = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\delta_{mn} = E_n\delta_{mn} \Rightarrow E_n = \langle \hat H \rangle_n = (\hat H)_{nn} = E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

билеты $\begin{cases} \text{Гармонич. осц. — до } \hat a, \hat a^+ \\ \text{Гарм. осц. } \hat a, \hat a^+, \text{ — после } \hat a, \hat a^+ \end{cases}$

Глава 4. Момент импульса

$\delta\varphi$ - угол
пов-т на угол $\delta\varphi$,
напр. совп. с напр. оси

§1. Оператор Момента

Изотропность пр-ва — все напр. экв-ны для замкн. сист. в отс. вн. полей
поворот в пр-ве относ. оси: (на ∞ малый угол)

$\delta\vec r_a = [\delta\vec\varphi, \vec r_a]$ $\qquad \Psi(\vec r_1 + \delta\vec r_1, \vec r_2 + \delta\vec r_2, \dots) = \{$разложим в ряд Тейлора$\} =$

измен. рад. вект. а- част.

$= \Psi(\vec r_1, \vec r_2, \dots) + \sum_a \delta\vec r_a \cdot \nabla_a \Psi + \dots =$ с точн. до лин. членов по малой величине

$= \{1 + \sum_a [\delta\vec\varphi, \vec r_a]\nabla_a\}\Psi = \{1 + \delta\varphi \sum_a [\vec r_a, \nabla_a]\}\Psi$

$\hat O = 1 + \delta\varphi \sum_a [\vec r_a, \nabla_a]$ — опер-р пов. на беск. малый угол $\delta\varphi$

физ. св-ва сист. не измен. при пов. на $\delta\vec\varphi$, $\Rightarrow$
$\hat O$ должен коммут. с $\hat H$ $\qquad [\hat O, \hat H] = 0$

$[\hat{O}, \hat{H}] = 0$ по анал. с класс. мех. сохр. вел-на есть момент импульса.

1. коммут. с $\forall$ опер. $\qquad \sum\limits_a [\vec{r}_a, \nabla_a]$ - мом. имп. сист. част.

$\delta\vec{\varphi} = const$

для 1 част. $[\vec{r}, \nabla]$ - мом. имп.

коэф. д.б. $= -i\hbar \qquad -i\hbar[\vec{r}\,\nabla] = [\vec{r}, \hat{\vec{p}}]$ анал. с кл. мех.

Условимся: будем выраж. мом. имп. в ед. $\hbar \Rightarrow \hbar\hat{\vec{l}} = [\vec{r}, \hat{\vec{p}}] = -i\hbar[\vec{r}, \nabla]$,

$\vec{l} = -[\vec{r}, \nabla] = -[\vec{r}, \frac{\partial}{\partial \vec{r}}]$ мом. имп.

$\hbar l_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, \quad \hbar l_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z, \quad \hbar l_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x$

20.03.12.

$\boxed{[r_i, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{ik}} \qquad [\hat{l}_x, x] = 0 \quad [\hat{l}_y, y] = 0 \quad [\hat{l}_z, z] = 0$

$\hbar\hat{l}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y \qquad \hbar[\hat{l}_x, y]\psi = (y\hat{p}_z - z\hat{p}_y)y\psi - y(y\hat{p}_z - z\hat{p}_y)\psi =$

$= \cancel{y^2\hat{p}_z\psi} - zy\hat{p}_y\psi + i\hbar z\psi - \cancel{y^2\hat{p}_z\psi} + \cancel{yz\hat{p}_y\psi} = i\hbar z\psi < ?$

$\hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y} \qquad [\hat{l}_x, y] = iz \quad [\hat{l}_y, z] = ix \quad [\hat{l}_z, x] = iy$

$[\hat{l}_x, z] = -iy \quad [\hat{l}_y, x] = -iz \quad [\hat{l}_z, y] = -ix$

$\boxed{[\hat{l}_i, \hat{r}_j] = i\,\varepsilon_{ijk} r_k} \qquad \varepsilon_{123} = \varepsilon_{231} = \varepsilon_{312} = 1$

$\varepsilon_{132} = \varepsilon_{321} = \varepsilon_{213} = -1$

$[\hat{l}_x, \hat{p}_x] = 0$ $\quad [\hat{l}_x, \hat{p}_y] = i\hat{p}_z$ $\quad [\hat{l}_x, \hat{p}_z] = -i\hat{p}_y$ $\quad \boxed{[\hat{l}_i, \hat{p}_j] = i\,\varepsilon_{ijk}\,\hat{p}_k}$

$[\hat{l}_y, \hat{p}_y] = 0$ $\quad [\hat{l}_y, \hat{p}_z] = i\hat{p}_x$ $\quad [\hat{l}_y, \hat{p}_x] = -i\hat{p}_z$

$[\hat{l}_z, \hat{p}_z] = 0$ $\quad [\hat{l}_z, \hat{p}_x] = i\hat{p}_y$ $\quad [\hat{l}_z, \hat{p}_y] = -i\hat{p}_x$

$$\begin{cases} \hbar\hat{l}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y \\ \hbar\hat{l}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z \end{cases}$$

Проверим коммут. ли отд-е компоненты момента:

$$\hbar[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = \hbar(\hat{l}_x\hat{l}_y - \hat{l}_y\hat{l}_x) = \hat{l}_x(z\hat{p}_x - x\hat{p}_z) - (z\hat{p}_x - x\hat{p}_z)\hat{l}_x =$$

$$= \underline{\hat{l}_x z\hat{p}_x} - \hat{l}_x x\hat{p}_z - \underline{z\hat{p}_x\hat{l}_x} + x\hat{p}_z\hat{l}_x = (\hat{l}_x z - z\hat{l}_x)\hat{p}_x - x(\hat{l}_x\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{l}_x) =$$

$$= (-iy\hat{p}_x + ix\hat{p}_y)\hbar = i\hbar\hat{l}_z$$

$[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hat{l}_z$ - не коммутируют

одновр. нельзя измерить две разл. компоненты момента

$[\hat{l}_y, \hat{l}_z] = i\hat{l}_x$ $\quad \boxed{[\hat{l}_i, \hat{l}_j] = i\,\varepsilon_{ijk}\,\hat{l}_k}$

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

Построим опер-р квадрата момента: $\hat{\vec{l}}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2$

$$[\hat{l}_x^2, \hat{l}_z] = \underline{\hat{l}_x^2\hat{l}_z} - \hat{l}_z\hat{l}_x^2 + \hat{l}_x\hat{l}_z\hat{l}_x - \underline{\hat{l}_x\hat{l}_z\hat{l}_x} = \hat{l}_x(\hat{l}_x\hat{l}_z - \hat{l}_z\hat{l}_x) +$$

$$+ (\hat{l}_x\hat{l}_z - \hat{l}_z\hat{l}_x)\hat{l}_x = -i(\hat{l}_x\hat{l}_y + \hat{l}_y\hat{l}_x)$$

$$[\hat{l}_y^2, \hat{l}_z] = \underline{\hat{l}_y^2\hat{l}_z} - \underline{\underline{\hat{l}_z\hat{l}_y^2}} + \underline{\underline{\hat{l}_y\hat{l}_z\hat{l}_y}} - \underline{\hat{l}_y\hat{l}_z\hat{l}_y} = \hat{l}_y(\hat{l}_y\hat{l}_z - \hat{l}_z\hat{l}_y) +$$

$$+ (\hat{l}_y\hat{l}_z - \hat{l}_z\hat{l}_y)\hat{l}_y = i(\hat{l}_y\hat{l}_x + \hat{l}_x\hat{l}_y)$$

$[\hat{l}_z^2, \hat{l}_z] = 0$ $\quad \boxed{[\hat{\vec{l}}^2, \hat{l}_z] = 0}$ $\quad [\hat{\vec{l}}^2, \hat{l}_x] = 0$ $\quad [\hat{\vec{l}}^2, \hat{l}_y] = 0$

$\hat{\vec{l}}^2$, $\hat{l}_z$ - использ. для хар-ки физич. системы, поскольку их опер-ры коммут. между собой

$$\boxed{\hat{\vec{l}}^2, \hat{l}_i = 0}$$

$\hat{l}_+ = \hat{l}_x + i\hat{l}_y, \quad \hat{l}_- = \hat{l}_x - i l_y, \quad \hat{l}_\pm = \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y$

$[\hat{l}_+, \hat{l}_-] = 2\hat{l}_z$

$$\left.\begin{aligned} [\hat{l}_z, \hat{l}_+] &= \hat{l}_+ \\ [\hat{l}_z, \hat{l}_-] &= -\hat{l}_- \end{aligned}\right\} \quad [\hat{l}_z, \hat{l}_\pm] = \pm\hat{l}_\pm$$

Операторы момента в сфер. коорд.-х

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

$$\frac{\partial}{\partial\varphi} = \frac{\partial x}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial z} = -y\frac{\partial}{\partial x} + x\frac{\partial}{\partial y} = \frac{1}{\hbar}(iy\hat{p}_x - ix\hat{p}_y) = i\hat{l}_z$$

$$\boxed{\hat{l}_z = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}} \qquad \hat{l}^2 = -\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

угловая часть оператора Лапласа (с точн. до коэф.)

Построим опер.-р пов.-та на конечный угол:

в ряд Тейлора

$$\hat{R}_\alpha\psi(\varphi) = \psi(\varphi+\alpha) = \psi(\varphi) + \alpha\frac{d}{d\varphi}\psi(\varphi) + \frac{\alpha^2}{2!}\frac{d^2}{d\varphi^2}\psi(\varphi) + \ldots =$$

$$\frac{d}{d\varphi} = i\hat{l}_z \qquad = \left[1 + i\alpha\hat{l}_z + \frac{(i\alpha\, l_z)^2}{2!}\ldots\right]\psi(\varphi) = e^{i\alpha\hat{l}_z}\psi(\varphi)$$

$\boxed{\hat{R}_\alpha = e^{i\alpha\hat{l}_z}}$ — оператор поворота на конечный угол

§ Собств. знач. и собств. ф. опер.-ра мом. импульса

$\hat{l}_z\Phi(\varphi) = m\Phi(\varphi)$ — **m**- собств. знач. опер. l_z (проекц. опер. на ось квантования)

$-i\frac{d}{d\varphi}\Phi(\varphi) = m\Phi(\varphi) \qquad \Phi(\varphi) = C\cdot e^{im\varphi}$ ф-я д.б. однозначна

$m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ в кв. мех. мом. имп. может принимать только дискр. значения

$$\int_0^{2\pi} dy\, \Phi_m^*(y)\, \Phi_n(y) = \delta_{mn}$$ нормировочное усл-е, $C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$

$\Phi_m(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{imy}$ – норм. волн. ф. $\hat{l}_z$ $\quad \left(\Phi(y) = C \cdot e^{imy} \right)$

‖ стацион. сост. системы, кот. отлич. только знач. кв. числа m, должны обладать одинак. энергией.

Интегралы движ. не могут зависеть от кв. числа m (иначе поворотом СК мы можем изменить энергию)

$\boxed{m \text{ - магнитное кв. число}}$

<u>Собств. знач. опер. $\hat{l}^2$:</u>

Ψ_m, $m = |m|$, $m = -|m|$, $|m_{max}| = l$ - max возможное число собств. ф. опер. $\hat{l}_z$

$\hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2$ рассм. опер-р $\hat{l}^2 - \hat{l}_z^2 = \underbrace{\hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2}_{\geq 0}$ - положит. физ. величина

if $\hat{l}_z \to \infty$, то слева будет отриц. число (это невозможно)

рассм. величину: $\hat{l}_z(\hat{l}_\pm \Psi_m) = \hat{l}_\pm(\hat{l}_z \pm 1)\Psi_m = \hat{l}_\pm(m \pm 1)\Psi_m = (m \pm 1)(\hat{l}_\pm \Psi_m)$

$[\hat{l}_z \hat{l}_\pm] = \pm \hat{l}_\pm$, $\quad \hat{l}_z \hat{l}_\pm = \hat{l}_\pm(\hat{l}_z \pm 1)$

$\hat{l}_z \Psi_m = m \Psi_m$

$\underline{\hat{l}_\pm \Psi_m}$ есть собств. ф. опер. $\hat{l}_z$ с собств. зн. $(m \pm 1)$

$\boxed{c \hat{l}_+ \Psi_m = \Psi_{m+1}}$, $\boxed{c' \hat{l}_- \Psi_m = \Psi_{m-1}}$ $\boxed{\hat{l}_+ \Psi_l = 0}$, нет кв. числа $l+1$

оператор $\hat{l}_+$ переводит Ψ_m в Ψ_{m+1} $\qquad \hat{l}_- \hat{l}_+ \Psi_l = 0$

$$\hat{l}_- \hat{l}_+ = \hat{\vec{l}}^2 - \hat{l}_z^2 - \hat{l}_z \qquad \hat{l}_- \hat{l}_+ \Psi_l = 0, \quad (\hat{\vec{l}}^2 - \hat{l}_z^2 - \hat{l}_z)\Psi_l = 0$$

$$\hat{\vec{l}}^2 \Psi_l = l(l+1)\Psi_l \qquad \hat{\vec{l}}^2 \Psi_l = l^2 \Psi_l \qquad \boxed{\vec{l}^2 = l(l+1)}$$ собств. знач. оператора $\hat{\vec{l}}^2$

Опер-ра $\hat{\vec{l}}$ не сущ-т! Извлекать $\sqrt{\ }$ бессмысленно! Все учебники, в кот. это делают, необх. употребить под заворачивание селедки!!!

$\boxed{l \text{ - азимутальное (орбит) кв. число}}$

$m = -l, -l+1, \dots 0, 1, \dots, l, l+1 \quad \Big|\ 2l+1$ знач. $\quad E_l \quad l = 0, 1, 2, \dots$

22.03.12.

$$\varphi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \qquad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \qquad \hat{\vec{l}}^2 \psi_{lm} = l(l+1)\psi_{lm} \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

$-l \leq m \leq l \qquad \hat{l}_z \psi_{lm} = m\psi_{lm} \qquad \psi_{lm}$ - собств. ф-я 2-х опер-в $\hat{l}^2$ и $\hat{l}_z$

Хотим найти ф-ю ψ_{lm}: $\quad \psi_{lm} = \Theta_{lm}(\vartheta)\varphi_m(\varphi)$

$$\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta \frac{\partial \psi_{lm}}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2 \psi_{lm}}{\partial\varphi^2} + l(l+1)\psi_{lm} = 0$$ ур-е на собств. ф-ции и собств. знач.

$$\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta \frac{\partial \Theta_{lm}(\vartheta)}{\partial\vartheta}\right) + [-m^2]\frac{1}{\sin^2\vartheta}\Theta_{lm}(\vartheta) + l(l+1)\Theta_{lm}(\vartheta) = 0$$

→ ур-е для присоед. полиномов Лежандра

$$\Theta_{lm}(\vartheta) = (-1)^{l+m} \sqrt{\frac{(2l+1)}{2}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \cdot P_l^m(\cos\vartheta)$$

нормированная

$$\boxed{P_l^m(\cos\vartheta) = \frac{\sin^m\vartheta}{2^l\, l!}\frac{d^{l+m}}{(d\cos\vartheta)^{l+m}}(\sin\vartheta)^{2l}}$$

присоедин. пол-н Лежандра

$\psi_{lm}(\vartheta, \varphi) = Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ - сферическая ф-я Лапласа

$\int d\Omega\, Y^*_{lm}(\vartheta,\varphi) Y_{l'm'}(\vartheta,\varphi) = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$ - усл-е нормировки $\quad Y_{l,m}$ - собств. ф-ции опер-в $\hat{l}^2$, $\hat{l}_z$

$Y^*_{lm}(\vartheta,\varphi) = (-1)^m Y_{l,-m}(\vartheta,\varphi)$ - св-во сферич. ф-й

$$\hat{l}^2 Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = l(l+1) Y_{l,m}(\vartheta,\varphi)$$
$$\hat{l}_z Y_{l,m}(\vartheta,\varphi) = m Y_{l,m}(\vartheta,\varphi)$$

$Y^*_{lm}(\vartheta,\varphi)\Big|\cdot\begin{cases}\hat{\vec{l}}^2 Y_{l,m}(\vartheta,\varphi) = l(l+1)Y_{l,m}(\vartheta,\varphi)\\ \hat{l}_z Y_{l,m}(\vartheta,\varphi) = m Y_{l,m}(\vartheta,\varphi)\end{cases}$ — ,, —

$(\hat{\vec{l}}^2)_{lm,lm} = l(l+1)$

$(\hat{l}_z)_{lm,lm} = m$

матрицы диагон. в собств. представлении

В представлении в кот. опер. $\hat{\vec{l}}^2$, $\hat{l}_z$ диаг., матр. опер-в $\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$ - не диаг. (будут иметь не диаг. матрицы) (т.к $\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$ - не коммут. с $\hat{l}_z$)

Определим матр. элементы опер-в $\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$:

$Y^*_{l,m}\cdot\Big|(\hat{\vec{l}}^2 - \hat{l}_z^2 + \hat{l}_z)Y_{l,m}(\vartheta,\varphi) = \hat{l}_+\hat{l}_- Y_{l,m}(\vartheta,\varphi)$ и $\int$ по всему телесному углу $d\Omega$

$l(l+1) - m^2 + m = (\hat{l}_+\hat{l}_-)_{lm,lm}$ диаг. матр. эл-т

$\psi^*_{lm}\,\Big|\, C\hat{l}_+\psi_{lm} = \psi_{l,m+1} \Rightarrow (\hat{l}_+)_{m+1,m}$

$\psi^*_{lm}\cdot\Big|\, C\hat{l}_-\psi_{lm} = \psi_{l,m-1} \Rightarrow (\hat{l}_-)_{m-1,m}$

отличные от нуля матр эл-т

$l(l+1) - m^2 + m = (\hat{l}_+)_{m,m-1}(\hat{l}_-)_{m-1,m}$

$\hat{l}_\pm = \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y \qquad \hat{l}_- = \hat{l}_+^+$ (т.к. $\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$ - эрмитовские)

$(\hat{l}_-)_{m-1,m} = (\hat{l}_+^+)_{m-1,m} = (\hat{l}_+)^*_{m,m-1}$

$l(l+1) - m^2 + m = \left|(\hat{l}_+)_{m,m-1}\right|^2 \rightarrow \quad (l+m)(l-m+1) = \left|(\hat{l}_+)_{m,m-1}\right|^2,$

$(\hat{l}_+)_{m,m-1} = \sqrt{(l+m)(l-m+1)}, \quad (\hat{l}_-)_{m-1,m} = \sqrt{(l+m)(l-m+1)}$

$$\left.\begin{aligned}\hat{l}_x &= \tfrac{1}{2}(\hat{l}_+ + \hat{l}_-)\\ \hat{l}_y &= -\tfrac{i}{2}(\hat{l}_+ - \hat{l}_-)\end{aligned}\right\}$$

$(\hat{l}_x)_{m,m-1} = \frac{1}{2}\left[(\hat{l}_+)_{m,m-1} + \underset{\overset{\shortparallel}{0}}{(\hat{l}_-)_{m,m-1}}\right] = \frac{1}{2}\sqrt{(l+m)(l-m+1)}$

$(\hat{l}_x)_{m-1,m} = \frac{1}{2}\left[\underset{\overset{\shortparallel}{0}}{(\hat{l}_+)_{m-1,m}} + (\hat{l}_-)_{m-1,m}\right] = \frac{1}{2}\sqrt{(l+m)(l-m+1)}$

Аналогично для $\hat{l}_y$: $(\hat{l}_y)_{m,m-1} = -\frac{i}{2}\sqrt{(l+m)(l-m+1)}$

$(\hat{l}_y)_{m-1,m} = \frac{i}{2}\sqrt{(l+m)(l-m+1)}$

Отличные от нуля матричные элементы.

§3. Четность состояния

преобразование инверсии: одновременная замена знаков всех простр-х коорд-т

$x \to -x$
$y \to -y$
$z \to -z$
$\vec{r} \to -\vec{r}$

} инверсия или зеркальное отражение

появл. новый з-н сохр.

$\boxed{\hat{P}\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r})}$ → еще раз подействуем $\hat{P}$ ⇒ $\hat{P}^2\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r})$

оператор инверсии

$\hat{P}\psi_p(\vec{r}) = P\psi_p(\vec{r})$ собств. ф-я

собств. значение опр

$\hat{P}^2\psi_p(\vec{r}) = P^2\psi_p(\vec{r}) \longrightarrow P^2 = 1$.

$\boxed{P = \pm 1}$ собств. значение опр. инв.

if волн. ф. не меняет знак при опр. инверсии - она наз. четной (состояние наз. четным)

-11- меняет знак - нечетной (сост. нечетное)

Инв. гамильтониана по отн. к операции инверсии означает, что он коммут. с опер-м инверсии.

Четность сост. будет <u>сохр.</u> во времени в <u>сильных и э/м взаимод-х</u>, но не сохр. в слабых

в сфер. коорд-х: $r \to r$, $\vartheta \to -\vartheta$, $\varphi \to \pi+\varphi$ (операция инверсии)

$P_l^m(\cos\vartheta)\,\Phi_m(\varphi) \sim Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$ Что произойдет с этой ф-й при операции инверсии?

$$\begin{cases} P_l^m[\cos(\pi-\vartheta)] = (-1)^{l+m} P_l^m(\cos\vartheta) \\ \Phi_m(\pi+\varphi) = (-1)^m \Phi_m(\varphi) \end{cases} \Rightarrow Y_{lm}(\pi-\vartheta, \pi+\varphi) = (-1)^l\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$$

$\boxed{P_l = (-1)^l}$ Четн. сост. с определ. l не зависит от m (иначе мы могли бы ее изменить повор. коорд-т)

§4 Сложение моментов

Физ. сист. состоит из 2-х частей (1) (2) в 1 прибл. они не взаим-т

1) $\hat{\vec{l}}_1^{\,2}, \hat{\vec{l}}_2^{\,2}, \hat{l}_{1z}, \hat{l}_{2z}$

2) $\hat{\vec{l}}_1^{\,2}, \hat{\vec{l}}_2^{\,2}, \hat{\vec{l}}^{\,2}, \hat{l}_z$ $\qquad \hat{\vec{l}}_1 + \hat{\vec{l}}_2 = \hat{\vec{l}}, \quad \hat{l}_{1z} + \hat{l}_{2z} = \hat{l}_z$

набор величин

соотнош. Δ-в: *

$|l_1 - l_2| \le l \le l_1 + l_2$

$m_1 + m_2 = m$

Как перейти от одного набора величин к другому?

ψ_{lm} хотим связать с $\psi_{l_1m_1}, \psi_{l_2m_2}$:

$$\boxed{\psi_{lm} = \sum_{m_1, m_2} \underbrace{(l_1m_1\, l_2m_2 | lm)}_{\text{Коэф-т Клебша-Гордана}} \psi_{l_1m_1} \psi_{l_2m_2}}$$

$$\boxed{\psi_{l_1m_1}\psi_{l_2m_2} = \sum_{l=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} (l_1m_1\, l_2m_2 | lm)\psi_{lm}}$$

обратный переход

действ. числа, в интервале $[-1, +1]$, они отличны от 0, когда выполнены соотн. *

1) $\sum\limits_{m_1, m_2} (l_1m_1\, l_2m_2 | lm)(l_1m_1\, l_2m_2 | l'm') = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$ | соотношение нормировки

2) $\sum\limits_{l=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} \sum\limits_{m=-l}^{l} (l_1m_1\, l_2m_2 | lm)(l_1m_1'\, l_2m_2' | lm) = \delta_{m_1m_1'}\delta_{m_2m_2'}$ | соотношение ортогональности

3 подсистемы: Рака́ коэф-ты

Правила сложения четности: ψ_1, ψ_2 } if подсистемы слабо взаимод: $\psi = \psi_1\psi_2$

$\boxed{P = P_1 \cdot P_2}$ четность системы есть произведение четностей подсистем

↓

З-н сохр. имеет мультипликативный хар-р (произведение) физ. сист. $A \to b + b$ распадается на 2 одинак. части

$P_A = P_b P_b (-1)^l = (-1)^l$, момент относит. движ. l

if $P_A = +1$, то $l = 0, 2, 4, \ldots$ подсист. мож в сост. только с четным l

if $P_A = -1$, то $l = 1, 3, 5, \ldots$

Пример: нестаб. ядро $^8Be \to \alpha + \alpha$ $l = 0, 2, 4, \ldots$ распавшиеся подсист. могут иметь только четн. сост.

Глава 5. Движение в центрально-симметр. поле

§1. Задача двух тел в кв. мех.

$|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| = r$ относит. расст. между част. $U(\underline{\underline{r}})$ - ц.сим. поле

сохр. момент импульса относ. центра поля (в центр. сим. поле)

из аналог. с класс. мех.: ф. Лагранжа $L_{кл} = \frac{m_1 \cdot \dot{\vec{r}}_1^2}{2} + \frac{m_2 \cdot \dot{\vec{r}}_2^2}{2} - U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$

центр-симметр. поле $\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}$; $\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1$ - относит-е расст-е между двумя частицами

класс. ф. Лагр. в новых коорд:

$L_{кл} = \frac{M \dot{\vec{R}}^2}{2} + \frac{\mu \cdot \dot{\vec{r}}^2}{2} - U(r)$ $M = m_1 + m_2$ полная масса $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$

Импульс $\vec{P} = \frac{\partial L_{кл}}{\partial \dot{\vec{R}}} = M \dot{\vec{R}}$ $\vec{p} = \frac{\partial L_{кл}}{\partial \dot{\vec{r}}} = \mu \dot{\vec{r}}$

импульс ц. масс импульс относит. движения двух частиц

$\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2$ $\frac{m_2}{M} \vec{p}_1 - \frac{m_2}{M} \vec{p}_2 = \vec{p}$

$H_{кл} = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$ $H_{кл} = \frac{\vec{P}^2}{2M} + \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + U(r)$

переход к кв. мех. $\vec{P} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{R}}$, $\vec{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{r}}$ заменим имп. опер-ми

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\vec{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\vec{r}} + U(r)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\vec R} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\vec r} + U(r)\right]\Psi(\vec R,\vec r) = \tilde E\,\Psi(\vec R,\vec r) \qquad E + E' = \tilde E$$

$\Psi(\vec R,\vec r) = \varphi(\vec R)\cdot\psi(\vec r)$ - будем искать реш-е в виде

$$\left(\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\vec R} + E'\right)\varphi(\vec R) = 0 \qquad\qquad \left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\vec r} + E - U(r)\right)\psi(\vec r) = 0$$

движ-е ц. масс двух тел

Ц. масс движ. свободно (нам это не интересно)

расм. это ур-е

$$\Delta\psi(\vec r) + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E - U(r)\right]\psi(\vec r) = 0$$

$U(r) \to$ удобно перейти к сфер. коорд.

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\underbrace{\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]}_{[\dots] = -\hat l^2}$$

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

$[\hat l^2, \hat H] = 0$ в центр-сим. поле опер. $\hat l^2$ и $\hat l_z$ коммут. с гамильтон-м

$[\hat l_z, \hat H] = 0$

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

$$\psi(\vec r) = \underbrace{R_l(r)}_{\text{радиальн. часть волн. ф.}}\ \underbrace{Y_{lm}(\theta,\varphi)}_{\text{углов. часть}}$$

углов. часть волн. ф-ции (собств. ф. опер-в $\hat l^2$ и $\hat l_z$)

получ. ур-е не содержит m → все состояния будут вырождены по m $(2l+1)$ - число проекц. момента на ось квантования

$$R_l(r) = \frac{\chi_l(r)}{r} \qquad \frac{d^2\chi_l(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E - U(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right]\chi_l(r) = 0$$

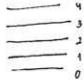
$$U_l(r) = U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}$$

$\frac{\hbar^2\hat l^2}{2\mu r^2}$ - оператор центробежной энергии

$\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}$ - центробежн. энергия

if спектр дискретный:

E_l



n_r - радиальное квант. число

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

Число узлов радиальн. волн. функции

поведение рад. волн. ф-ции вблизи т. $r\to 0$ (слабосингулярный потенциал)

$$\boxed{\lim_{r\to 0} r^2 U(r)=0}$$

слабосингулярн. потенциал

$$\frac{d}{dr}\left[r^2\frac{dR_l}{dr}\right]-l(l+1)R_l(r)=0,$$ при $r\to 0$ E и $U(r)$ - малые члены

$R_l(r)=C\cdot r^s$

$s(s+1)-l(l+1)=0 \qquad s=l,\ s=-l-1 \qquad R_l(r)=C_1r^l+\underbrace{C_2r^{-l-1}}$

нарушается гран. усл. (рад. ф-я в нуле д.б. конечна) - частицы падают на центр. Нельзя будет пронормир. волн. ф. расх. в дискр. спектре

§2 Свободное движение с определенным значением орбит. момента

$U(r)=0$ - свободное движ-е

$$\frac{d^2\chi(r)}{dr^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}\chi(r)+\frac{2\mu}{\hbar^2}E\chi(r)=0$$ ур-е для радиальных ф-й χ.. (энер. м.б. только положит.)

$$K=\frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar},\quad \chi''_{Kl}(r)+\left[K^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi_{Kl}(r)=0, \qquad K,\ l$$

χ_{Kl} будет хар-ся квант. чис. K, l $\quad \Psi_{Klm}(\vec r)=\frac{\chi_{Kl}(r)}{r}\cdot Y_{lm}(\theta,\varphi)$

Нормируем полную волнов. ф-ю: $\int d^3r\, \psi^*_{Klm}(\vec r)\psi_{K'l'm'}(\vec r)=\delta_{ll'}\delta_{mm'}\delta(K-K')$

$$\chi''(r)+\left[\frac{2\mu E}{\hbar^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi_{El}(r)=0 \qquad R_{El}=\frac{\chi_E(r)}{r},\quad R_{Kl}=\frac{\chi_{Kl}(r)}{r}$$

$$\int d^3r\,\psi^*_{Elm}(\vec r)\psi_{E'l'm'}(\vec r)=\delta_{ll'}\delta_{mm'}\delta(E-E') \qquad \delta[\varphi(f')-\varphi(f)]=\frac{1}{\left|\frac{d\varphi(f)}{df}\right|}\delta(f'-f)$$

$$E=\frac{\hbar^2K^2}{2\mu},\quad \frac{dE}{dK}=\frac{\hbar^2K}{\mu} \qquad R_{El}(r)=\sqrt{\frac{dK}{dE}}R_{Kl}(r),\quad R_{El}(r)=\sqrt{\frac{\mu}{\hbar^2K}}R_{Kl}(r)$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left[r^2\frac{dR_{kl}(r)}{r}\right] = \frac{d^2R_{kl}(r)}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR_{kl}(r)}{dr}$$ $\xi = kr$ - безразмерн. величина

$$\left[\frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{2}{\xi}\frac{d}{d\xi} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{\xi^2}\right]\right] R_{kl}(\xi) = 0$$ ур-е Бесселя

реш-е этого ур-я: сферич. ф-ции Бесселя:

$j_l(\xi)$ - Бесселя } сферич. - регулярное реш-е ур-я
$n_l(\xi)$ - Неймана } - нерегулярное реш-е ур-й

$$j_l(\xi) = \sqrt{\frac{\pi}{2\xi}}\, \underbrace{J_{l+\frac{1}{2}}(\xi)}_{\text{цилиндр. ф. Бесселя}}, \qquad n_l(\xi) = (-1)^{l+1}\cdot\sqrt{\frac{\pi}{2\xi}}\, J_{-l+\frac{1}{2}}(\xi)$$

$$j_l(\xi) = \begin{cases} \frac{\xi^l}{(2l+1)!!}, & \xi \to 0 \\ \frac{1}{\xi}\sin\left(\xi - \frac{\pi l}{2}\right), & \xi \to \infty \end{cases} \qquad n_l(\xi) = \begin{cases} -(2l-1)!!\,\xi^{-(l+1)}, & \xi \to 0 \\ -\frac{1}{\xi}\cos\left(\xi - \frac{\pi l}{2}\right), & \xi \to \infty \end{cases}$$

$$R_{kl}(r) = C_1 j_l(\xi) + C_2 n_l(\xi)$$

фаза на бесконечности (опред-ся велич. потенц. энергии)

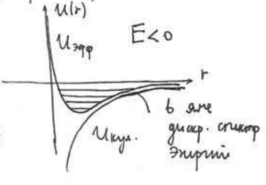
$\xi \to \infty$ $R_{kl}(r) \approx C_1 \frac{\sin\left(kr - \frac{\pi}{2}l\right)}{kr}$, if $U \neq 0$ $R_{kl}(r) \approx C_1 \frac{\sin\left(kr - \frac{\pi}{2}l + \delta_l\right)}{kr}$

§3. Движение в кулоновском поле ($E<0$).

точное решение $U(r) = -\frac{Ze^2}{r}$ в/п атомы

кулоновское поле - притяжение

эфф. потенц. энергия: $U_{эфф}(r) = \underbrace{-\frac{Ze^2}{r}}_{\text{кулонов. энергия}} + \underbrace{\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}}_{\text{центроб. энерг.}}$



ур-е Шр. для рад. части волн. ф-ции:

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2}R(r) + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E + \frac{Ze^2}{r}\right]R(r) = 0$$

Безразмерные величины: $\rho = 2\sqrt{A}\, r$

$A = -\frac{2\mu E}{\hbar^2} > 0$ (т.к. $E<0$), $B = \frac{\mu Z e^2}{\hbar^2} > 0$ - обозначим const

Переход к нов. переменным: $R''(\rho) + \frac{2}{\rho}R'(\rho) + \left\{-\frac{1}{4} + \frac{B}{\sqrt{A}}\frac{1}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right\}R(\rho) = 0$

$\rho \to 0 \quad R(\rho) \sim \rho^l \qquad \rho \to \infty \quad R''(\rho) - \frac{1}{4}R(\rho) = 0, \; R(\rho) = e^{-\frac{1}{2}\rho}$ асимптотики волнов. ф-ции

$R(\rho) = \rho^l e^{-\frac{\rho}{2}} u(\rho)$ - будем искать реш-е в таком виде

$u(\rho)$ - надо найти

29.03.12.

$R'' + \frac{2}{\rho}R' + \left\{-\frac{1}{4} + \frac{B}{\sqrt{A}}\cdot\frac{1}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right\}R = 0 \qquad R'(\rho) = \left\{l\rho^{l-1}u + \rho^l u' - \frac{1}{2}\rho^l u\right\}e^{-\frac{\rho}{2}}$

$A = \frac{-2\mu E}{\hbar^2} > 0, \quad B = \frac{\mu Z e}{\hbar^2} > 0 \quad \rho = 2\sqrt{A}\, r \quad \overset{?}{R''(\rho)} = \left\{\rho^l u'' - \rho^l u' + 2l\rho^{l-1}u' + \frac{1}{4}\rho^l u - \right.$

$\left. - l\rho^{l-1}u + l(l-1)\rho^{l-2}u\right\}e^{-\frac{\rho}{2}}$

$\frac{\rho}{\rho^{l-2}}\Big| \; \rho^2 u'' - \rho^2 u' + 2l\rho u' + \frac{1}{4}\rho^2 u - l\rho u + l^2 u - l u + 2l u + 2\rho u' - \rho u - \frac{1}{4}\rho^2 u + \frac{B}{\sqrt{A}}\rho u - l^2 u - l u = 0$

$\rho u'' + [2(l+1) - \rho]u' + \left[\frac{B}{\sqrt{A}} - l - 1\right]u = 0$

решение этого ур-я: вырожденная гипергеометрическая ф-я

Рассмотрим частный случай, когда коэф. при $u = 0 \Rightarrow \frac{B}{\sqrt{A}} - l - 1 = 0$

$\rho u'' + [2(l+1) - \rho]u' = 0 \qquad u(\rho) = C$

$\frac{B}{\sqrt{A}} = l + 1 = n, \quad l = 0, 1, 2, \ldots \quad n = 1, 2, 3, \ldots$ главное кв. число

$\frac{B^2}{A} = n^2, \; -\frac{\mu^2 Z e^4 \hbar^2}{\hbar^4 2\mu E_n} = n^2 \qquad \boxed{E_n = -\frac{\mu Z e^4}{2\hbar^2 n^2}}$ энергия зар. частицы в кулон. поле

$(E<0)$

$R_{nl}(\rho) = R_{n,n-1}(\rho) = C\rho^{n-1} e^{-\frac{\rho}{2}}$ - радиальн. часть волн. ф-ции

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} dr \cdot \underbrace{r^2 R^2_{n,n-1}(\rho)} = 1$$ - нормировка, $C = \sqrt{\frac{8z^3}{n^3 a_0^3 (2n)!}}$

осн. состояние ат. H - сост. с наим. энергией

$\Psi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$ - полная волн. ф.

$$\boxed{\Psi_{100}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}}$$

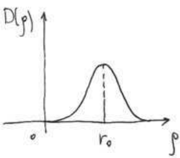
$Y_{00}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$

чтобы квадрат. $\int$ по $d\Omega$ дал 1

Это состояние не имеет класс. аналога

$\boxed{a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}}$ - радиус 1-й боровской орбиты, хотя орбит у $\bar{e}$ нет)))

$D(\rho) = r^2 \cdot R^2_{n,n-1}(\rho)$ - величина, стоящая под знаком норм-го $\int$ - хар-т распр-е плотн. вероятности как ф-ю радиуса



$\rho_0 = \rho_{max} = 2n$ $\quad r_0 = \frac{n^2}{z} a_0$ - наиб. вер. нах. $\bar{e}$ от ядра

соответствует в клас. пределе круговой орбите

$$\rho u'' + [2(l+1) - \rho] u' + \left[\frac{B}{\sqrt{A}} - l - 1\right] u = 0$$

вырожденная гипергеом. ф-я - это ф-я, удовлетвор. ур-ю $x \frac{d^2F}{dx^2} + (\beta - x)\frac{dF}{dx} - \alpha F = 0$

в виде ряда: $F(\alpha, \beta, x) = 1 + \frac{\alpha}{\beta} \frac{x}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\beta(\beta+1)} \frac{x^2}{2!} + \ldots$ $\Big\|$ вырожденная гипергеом. ф-я

$$\boxed{u(\rho) = C \cdot F\left(l + 1 - \frac{B}{\sqrt{A}}, 2l+2, \rho\right)}$$, $F(\alpha, \beta, 0) = 1$ при малых ρ

Спектр дискретный → частица соверш. инфин. дв-е $|\rho| \to \infty$

$$F(\alpha, \beta, \rho) = \frac{\Gamma(\beta)}{\Gamma(\beta - \alpha)} (-\rho)^{-\alpha} \left[1 + \frac{\alpha}{\rho}(\beta - \alpha - 1) + \ldots\right] + \frac{\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha)} \rho^{\alpha - \beta} e^{\rho} \left[1 + \frac{(\alpha - \beta)(\alpha - 1)}{\rho} + \ldots\right]$$

$F(\rho) = \rho^l e^{-\frac{\rho}{2}} u(\rho)$

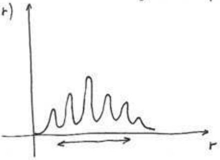
Г-ф. обращ. в ∞, if ее аргумент 0 или отриц. число

$\alpha = -n_r \quad n_r = 0, 1, 2, \dots \qquad l + 1 - \frac{B}{\sqrt{A}} = -n_r \qquad \frac{B}{\sqrt{A}} = n_r + l + 1 = n \quad n = 1, 2, 3, \dots$

n_r - радиальное квант. число

вырожд. гипергеомет. ф-я: сводится к обобщенному полиному Лагерра

$$\int_0^\infty dr \cdot r^2 R_{nl}^2(r) = 1 \qquad D(r) = r^2 R_{nl}^2(r)$$



общий случай соотв-т эллипт. орбитам

(в класс. пределе)

есть вырождение по $\underline{\underline{l}}$ $\qquad \Psi_{nlm}$

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

Почему?

$\underline{\underline{\text{Th}}}$. if есть два опер-ра, коммут. с гамильтонианом, но не коммут-е др. с др., то состояние сист. вырождено

$[\hat{f}, \hat{H}] = 0 \quad [\hat{g}, \hat{H}] = 0 \quad [\hat{f}, \hat{g}] \neq 0$

можем построить совместную сист. собств-х ф-й $\hat{H}\psi = E\psi$, $\hat{f}\psi = f\psi$

$\hat{H}(\hat{g}\psi) = \hat{g}(\hat{H}\psi) = E(\hat{g}\psi)$ $\qquad \hat{g}\psi \neq c\psi$ $\quad \psi$ - не м.б. собств. ф-й оператора g, поскольку она есть собств. ф. опер. $\hat{f}$

состояние вырождено

$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r}, \quad \hat{l}^2$ $\qquad$ Найдем опер-р, кот. коммут. с $\hat{H}$, но не коммут. с $\hat{l}^2$

$\vec{\varepsilon} = \frac{\vec{r}}{r} + \frac{1}{\mu Z e^2}[\vec{l} \times \vec{p}]$ — вектор Рунге-Ленца (в-р эксцентриситета)

возникает в задаче Кеплера (класс. мех.) $\boxed{\hat{\vec{\varepsilon}} = \frac{\vec{r}}{r} + \frac{1}{2\mu Z e^2}\left\{[\hat{\vec{l}} \times \hat{\vec{p}}] - [\hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{l}}]\right\}}$

$[\hat{H}, \hat{\vec{l}}^2] = 0$ $\quad [\hat{\vec{l}}^2, \hat{\mathcal{E}}] = 0$ - из-за этого происх. вырождение

$[\hat{H}, \hat{\mathcal{E}}] = 0$ $\quad$ В ц.с. поле $\psi_{nlm}(\vec{r})$

$\vec{l}$ - не наблюд. величина

$\psi_{nl}(\vec{r}) = \sum_{m=-l}^{l} c_m \psi_{nlm}(\vec{r})$ по пр-пу суперпозиции четность $P_l = (-1)^l$

ат. водорода: $\boxed{\psi_n(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} c_{lm} \psi_{nlm}(\vec{r})}$, состояние, не обладающее опред. четностью

дополнит. вырождение по l

глава 6: Теория представлений

§1 различные представления в-ра состояния

$\psi_a(\xi)$ $\quad$ Поль Дирак: $\psi_a(\xi) = \underbrace{\langle \xi | a \rangle}_{\text{скал-е произв-е бра- и кэт-в-в.}}$, $\langle \xi |$ $\downarrow$ бра-вектор, $| a \rangle$ $\downarrow$ кэт-вектор

ξ - индекс-представления

a - индекс-состояния

волновая ф-я в коорд-м представлении, ξ - коорд.

$\boxed{|a\rangle \text{ кэт-вектор}}$ - образует бесконечномерное пр-во (Гильбертово, if спектр дискретный)

связь между бра- и кэт векторами

$\langle a|$ - тоже образ. Гильб. пр-во

$\mathcal{H}_{|a\rangle} = \mathcal{H}^*_{\langle a|}$ изоморфны эти пр-ва $\langle a| = |a\rangle^+$

$\langle a| \not+ |b\rangle$ эти в-ры принадлежат разн. пр-м (склад. нельзя)

$\langle a| + \langle b| = \langle c|, \quad |a\rangle + |b\rangle = |c\rangle$

волн. ф-я есть скал. произв.

эрмитовские опер-ры действ. со стор. |

$|b\rangle = \hat{F}|a\rangle$, $\langle b| = \langle a|\hat{F}^+ = \langle a|\hat{F}$

разлож. кэт-вра $|a\rangle$ по полн. набору кэт-в-в $|F\rangle$

полный набор кэт-векторов $\quad |a\rangle = \sum_F |F\rangle\langle F|a\rangle$

совокупн. коэф. $\langle F|a\rangle$ предст. собой волн.ф-ю сост. a в F представлении

04.04.12.

Линейное (векторное) пр-во

$\langle a|$ - бра-вектор

$|a\rangle$ - кэт-вектор

$|a\rangle = \sum_F |F\rangle \underbrace{\langle F|a\rangle}_{\text{коэф. разложения}}$ величины F составл. дискр. спектр (т.к идет $\sum_F$)

$\boxed{\sum_F |F\rangle\langle F| = 1}$ — не скал. произв-е, обяз. должно выполняться

$\langle a_n|a_n\rangle$ - это есть скал. произв-е

разложить кэт. в-р a по непр. спектру:

$|a\rangle = \int d\xi |\xi\rangle\langle\xi|a\rangle$, $\boxed{\int |\xi\rangle d\xi \langle\xi| = 1}$

усл-е нормир-ки векторов состояния в дискр. спектре

$\langle a_m|a_n\rangle = \delta_{mn}$ - в дискр.

$\langle a|a'\rangle = \delta(a-a')$ - в непр. спектре

$\langle\xi|a\rangle$ - координ. предст.

$\langle\vec{p}|a\rangle$ - импульсное предст.

$\langle E_n|a\rangle$ - энергетич. предст.

$\langle\xi|a\rangle = \int d^3p \underbrace{\langle\xi|\vec{p}\rangle}_{\text{коэф. разл}}\overbrace{\langle\vec{p}|a\rangle}^{\text{в-р состояния в имп. предст.}}$

Хотим перейти к импульсному предст-ю

$\int d^3p |\vec{p}\rangle\langle\vec{p}| = 1$

$\sum_n |E_n\rangle\langle E_n| = 1$ в Дираковском формализме

$\sum_n \langle\xi|E_n\rangle \underbrace{\langle E_n|a\rangle}_{\text{коэф. разл.}} = \langle\xi|a\rangle$

в-р сост. в энерг. предст.

$\int dE |E\rangle\langle E| = 1 \quad \Rightarrow \quad \langle\xi|a\rangle = \int dE \langle\xi|E\rangle\langle E|a\rangle$

if спектр энергий непр.

$$|a\rangle \to \begin{cases} \langle E_n|a\rangle \\ \langle \vec{p}|a\rangle \\ \langle \xi|a\rangle \end{cases}$$ Можем переходить к $\forall$ представлениям, которая нам нужны

Собств. ф-я оператора импульса в коорд. предст:

$$\Psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\vec{p}\vec{r}} = \{\text{перейдем к формализму Дирака}\} = \langle \vec{r}|\vec{p}\rangle$$

$\vec{r}$ - непр. величина $\quad \int d^3r \langle \vec{r}|\vec{p}\rangle\langle \vec{p}'|\vec{r}\rangle = \delta(\vec{p}-\vec{p}')$

$\langle \vec{p}|\vec{p}'\rangle = \delta(\vec{p}-\vec{p}')$ усл-е нормир-ки в непр. спектре, $\langle \vec{r}|\vec{p}\rangle = \langle \vec{p}|\vec{r}\rangle^*$

$$\langle \vec{p}|\vec{r}\rangle = \langle \vec{r}|\vec{p}\rangle^* = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-i\vec{p}\vec{r}} = \underset{\text{индекс-состояния}}{\Psi_{\vec{r}}}(\vec{p})$$ → собств. ф-я опер-ра коорд-ты в импульсном предст-ии

§2. Различные представления операторов

$\underbrace{|b\rangle\langle a|}_{\substack{\text{есть оператор} \\ \text{проекционный опер-р}}} = \hat{G}, \quad \hat{G}|c\rangle = |b\rangle\langle a|c\rangle$ проект. с на b с коэф.

$$|a\rangle = \sum_n |F_n\rangle\langle F_n|a\rangle$$

вектор-состояния разлож. по полн. набору в-в

разложим оператор по полн. набору проекц-х опер-в:

$$\langle F_\alpha| \cdot \Big| \hat{K} = \sum_m \sum_n K_{mn} |F_m\rangle\langle F_n| \Big| \cdot |F_\beta\rangle$$

$$\langle F_\alpha|\hat{K}|F_\beta\rangle = \sum_m\sum_n K_{mn} \underbrace{\langle F_\alpha|F_m\rangle}_{\delta_{\alpha m}} \underbrace{\langle F_n|F_\beta\rangle}_{\delta_{\beta n}} = K_{\alpha\beta}$$ величины образуют матрицу

$\boxed{K_{\alpha\beta} = \langle F_\alpha|\hat{K}|F_\beta\rangle}$ - матричный эл-т опер-ра $\hat{K}$ в F-представлении

$$K_{\alpha\beta} = \int d^3p\, d^3p' \langle F_\alpha|\vec{p}\rangle \underbrace{\langle \vec{p}|\hat{K}|\vec{p}'\rangle}_{\substack{\text{матр. эл-т опер. } \hat{K} \text{ в} \\ \text{импульс. предст.}}} \langle \vec{p}'|F_\beta\rangle$$

$\int d^3p |\vec{p}\rangle\langle\vec{p}| = 1$

{ „делаем разрез вдоль верт. линии и вставляем единичку" }

$\sum_n |E_n\rangle\langle E_n| = 1 \qquad K_{\alpha\beta} = \sum_n \sum_m \langle F_\alpha|E_n\rangle\langle E_n|\hat{K}|E_m\rangle\langle E_m|F_\beta\rangle$

$\langle \xi|\hat{H}|E_n\rangle = E_n\langle\xi|E_n\rangle \qquad \langle E_m|\hat{H}|E_n\rangle = E_n \begin{cases} \cdot\delta_{mn} & \text{дискр.} \\ \cdot\delta(E_m - E_n) & \text{непр. спектр} \end{cases}$

$\langle\xi|E_n\rangle = \Psi_{E_n}(\xi)$

$\hat{H}|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle$

ур-е на собств. знач.

Задача. $\hat{\vec{p}} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{r}}$ || получить опер-р коорд. в импульсном представ. $\hat{\vec{r}}$ - ? ||

$\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle, \quad \langle\vec{r}|\hat{\vec{p}}|\vec{p}\rangle = \vec{p}\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle \qquad \hat{\vec{p}}|\vec{p}\rangle = \vec{p}|\vec{p}\rangle$

собств. ф. опер. $\vec{p}$ в коорд. представл.

рассм. матр. эл-т: $\langle\vec{p}'|\hat{\vec{p}}|\vec{p}\rangle = \vec{p}\langle\vec{p}'|\vec{p}\rangle = \vec{p}\,\delta(\vec{p}' - \vec{p})$

$\langle\vec{p}'|\hat{\vec{r}}|\vec{p}\rangle = \int d^3r\,\langle\vec{p}'|\hat{\vec{r}}|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle = \int d^3r\,\vec{r}\langle\vec{p}'|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{p}}\int d^3r\langle\vec{p}'|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle \ominus$

$\hat{\vec{r}}|\vec{r}\rangle = \vec{r}|\vec{r}\rangle$

Как избавиться от $\vec{r}$?

воспольз. явным видом функции: $\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}}$

$\vec{r}\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{p}}\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle$

вот как

$\ominus -i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{p}}\langle\vec{p}'|\vec{p}\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{p}}\delta(\vec{p}' - \vec{p})$

$\langle\vec{p}|\hat{\vec{r}}|a\rangle = \int d^3p'\langle\vec{p}|\hat{\vec{r}}|\vec{p}'\rangle\langle\vec{p}'|a\rangle = -i\hbar\int d^3p'\left[\frac{\partial}{\partial\vec{p}'}\delta(\vec{p} - \vec{p}')\right]\langle\vec{p}'|a\rangle =$

$\langle\vec{p}|\hat{\vec{r}}|\vec{p}'\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{p}'}\delta(\vec{p} - \vec{p}') \qquad = i\hbar\int d^3p'\cdot\delta(\vec{p} - \vec{p}')\frac{\partial}{\partial\vec{p}'}\langle\vec{p}'|a\rangle =$

$= i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{p}}\langle\vec{p}|a\rangle = \langle\vec{p}|\,i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{p}}\,|a\rangle \qquad \boxed{\hat{\vec{r}} = i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{p}}}$ оператор координаты в импульсн. представлении

$\boxed{\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + U(i\hbar\nabla_{\vec{p}})}$ - опер-р Гамильт. в импульсн. представл.

$$\langle \vec p'|\hat H|\vec p\rangle = \frac{\vec p^{\,2}}{2m}\delta(\vec p'-\vec p) + \langle \vec p|\mathcal{U}(i\hbar\nabla_{\vec p})\vec p\rangle = \frac{\vec p^{\,2}}{2m}\delta(\vec p'-\vec p) + \sum_n \langle \vec p|\frac{(i\hbar\nabla_{\vec p})^n}{n!}\mathcal{U}^{(n)}(0)|\vec p\rangle \ominus$$

$$\langle \vec p'|\hat{\vec r}^{\,n}|\vec p\rangle = (-1)^n (i\hbar)^n \frac{\partial^n}{\partial \vec p^{\,n}}\delta(\vec p'-\vec p)$$

$$\langle \vec p'|\vec r|\vec p\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial \vec p}\delta(\vec p'-\vec p)$$

$$\ominus \left[\frac{\vec p^{\,2}}{2m} + \mathcal{U}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial \vec p}\right)\right]\delta(\vec p'-\vec p)$$

§3. Канонические преобразования

(переход от одного представления к другому)

рассм. переход от E_n к ξ

$$\langle \xi|a\rangle = \hat S \cdot \langle E_n|a\rangle = \sum_n \langle \xi|E_n\rangle\langle E_n|a\rangle \Rightarrow \quad \hat S \to \langle \xi|E_n\rangle$$

оператору $\hat S$ соотв. ядро $\langle \xi|E_n\rangle$

$$\langle \xi|b\rangle = \hat T\langle \vec p|b\rangle = \int d^3p\,\langle \xi|\vec p\rangle\langle \vec p|b\rangle \Rightarrow \quad \hat T \to \langle \xi|\vec p\rangle$$

обратное преобраз-е:

$$\langle E_n|a\rangle = \hat S^{-1}\langle \xi|a\rangle = \int d\xi\,\langle E_n|\xi\rangle\langle \xi|a\rangle, \qquad \hat S^{-1} \to \langle E_n|\xi\rangle = \langle \xi|E_n\rangle^* = \langle \xi|E_n\rangle^+$$

$$\langle \vec p|a\rangle = \hat T^{-1}\langle \xi|b\rangle = \int d\xi\,\langle \vec p|\xi\rangle\langle \xi|b\rangle \qquad \hat T^{-1} \to \langle \vec p|\xi\rangle = \langle \xi,\vec p\rangle^* = \langle \xi,\vec p\rangle^+$$

$\boxed{\hat S^{-1} = \hat S^+, \quad \hat T^{-1} = \hat T^+}$ – унитарные опер-ры

Канонич. преобраз. осущ. унитарн. операторами!

$\hat F^+ = \hat F$ · эрм., $\hat F^+ = \hat F^{-1}$ · унитарн.

$$\boxed{\begin{aligned}\hat S^+\hat S = 1\\ \hat T^+\hat T = 1\end{aligned}}$$

05.04.12.

Как при канонич. преобраз. меняются операторы физ. величин?

$\hat S\langle \xi|a\rangle = \langle x|a\rangle \qquad S\langle \eta|a\rangle = \langle y|a\rangle$ унитарн. опер. S

вектор состояния a в ξ-представлении

Хотим найти вид опер-ра: $\langle \eta|a\rangle = \underbrace{\hat F_\xi}\langle \xi|a\rangle$

$$\langle \psi | a\rangle = \hat{S}\langle \eta | a\rangle = \hat{S}\,\underset{\text{сюда вставим } \hat{S}^{-1}S=1}{\hat{F}_\xi}\langle \xi | a\rangle = \hat{S}\hat{F}_\xi\hat{S}^{-1}\hat{S}\langle \xi | a\rangle = \underbrace{(\hat{S}\hat{F}_\xi\hat{S}^{-1})}_{\hat{F}_x}\langle x | a\rangle = \hat{F}_x\langle x | a\rangle$$

$\boxed{\hat{F}_x = \hat{S}\hat{F}_\xi S^{-1}}$ правила преобраз. операторов при канонич. преобраз

$\boxed{\hat{F}_\xi = \hat{S}^{-1}\hat{F}_x\hat{S}}$

1) Коммутационные соотн.-я
2) спектр собств.-знач.

} <u>inv относ. канонич. преобраз.</u>

<u>§4. Изменение состояний физ. системы с течением t</u>

(эволюция физ. системы)

представления как набор переменных

теперь рассм. представления, кот. опис. изменения сост. физ. сист. с теч. вр.

Их <u>три</u>:

<u>4.1.</u> Шредингеровское представление

$i\hbar\frac{\partial\Psi(t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(t)$ ур. Шр.

$\Psi(t) = \hat{R}(t,t_0)\Psi(t_0)$ Наша задача выяснить, что это за опер.-р?

Хотим связать в.ф. в мом. вр. $\underline{t_0}$ с в.ф. в м. вр. $\underline{t}$

$\boxed{\hat{R}(t_0,t_0) = 1}$ волн. ф. д.б. нормированы: $\langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle = \langle\Psi(t_0)|\Psi(t_0)\rangle = \underline{1}$

$$\langle\hat{R}(t,t_0)\Psi(t_0)|\hat{R}(t,t_0)\Psi(t_0)\rangle = \langle\Psi(t_0)|\hat{R}^+(t,t_0)\hat{R}(t,t_0)|\Psi(t_0)\rangle = 1$$

Дираковское предст.-е

действ.

$\{\langle a|^+ = |a\rangle\}$

$\hat{R}^+(t,t_0)\hat{R}(t,t_0) = 1$ $\quad\underline{\hat{R}(t,t_0)}$ - явл. унитарным

<u>def</u>: оператор эволюции или опер.-р временного сдвига - преобр. в.ф. в мом. вр. t_0 к волн.ф. в мом. вр. t

$$i\hbar \frac{\partial \hat{R}(t,t_0)}{\partial t}\Psi(t_0) = \hat{H}\hat{R}(t,t_0)\Psi(t_0)$$ можно опустить $\Psi(t_0)$

$$i\hbar \frac{\partial \hat{R}(t,t_0)}{\partial t} = \hat{H}\hat{R}(t,t_0)$$ надо решать с нач. усл. $\hat{R}(t_0,t_0)=1$

$$\boxed{\hat{R}(t,t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}\right]}$$ – явн. вид опер. эволюции, выраж. через гамильт. системы

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

в Шр. предст. в. ф. зав. от вр., а операторы физ. величин не зависят.

4.2 Гайзенберговское представление Heisenberg

! волн. ф. от вр. не зависит, а вся временная зав-ть содерж. в операторах!

Давайте выберем волн. ф. $\Psi_H = \Psi_S(t_0)$ } гайзенберговскую в. ф. как шредингеровскую в мом. вр. t_0

$\Psi_S(t) = \hat{R}(t,t_0)\Psi_S(t_0)$, $\Psi_H = \hat{R}^{-1}(t,t_0)\Psi_S(t)$

$$\hat{Q}_H(t) = \hat{R}^{-1}(t,t_0)\hat{Q}_S\hat{R}(t,t_0) \quad \Big|\ \text{продиф. по вр. и} \ \Big|\ *\ i\hbar$$

$$i\hbar\frac{d\hat{Q}_H(t)}{dt} = i\hbar\frac{\partial \hat{R}^{-1}(t,t_0)}{\partial t}\hat{Q}_S(t,t_0)\hat{R}(t,t_0) + i\hbar\hat{R}^{-1}(t,t_0)\hat{Q}_S\frac{\partial \hat{R}(t,t_0)}{\partial t}$$

$$i\hbar\frac{d\hat{R}(t,t_0)}{dt} = \hat{H}\hat{R}(t,t_0)$$

$$\hat{R}^{-1}\hat{R} = 1 \Rightarrow \frac{\partial \hat{R}^{-1}}{\partial t}\hat{R} + \hat{R}^{-1}\frac{\partial \hat{R}}{\partial t} = 0 \rightarrow$$

$$i\hbar\ \Big|\ \frac{\partial \hat{R}^{-1}}{\partial t} = -\hat{R}^{-1}\frac{\partial \hat{R}}{\partial t}\hat{R}^{-1}$$

$$-\hat{R}^{-1}\hat{H}\hat{R}\hat{R}^{-1} = -\hat{R}^{-1}\hat{H}$$

$$i\hbar\frac{d\hat{Q}_H(t)}{dt} = -\hat{R}^{-1}\hat{H}\hat{Q}_S\hat{R} + \hat{R}^{-1}\hat{Q}_S\hat{H}\hat{R} =$$

$\hat{R}\hat{R}^{-1}$

$$= -(\hat{R}^{-1}\hat{H}\hat{R})(\hat{R}^{-1}\hat{Q}_S\hat{R}) + (\hat{R}^{-1}\hat{Q}_S\hat{R})(\hat{R}^{-1}\hat{H}\hat{R}) =$$

$$\hat{R}^{-1}\hat{H}\hat{R} = \hat{H}$$

$$= -\hat{H}\hat{Q}_H(t) + \hat{Q}_H(t)\hat{H} = -[\hat{H},\hat{Q}_H(t)] = [\hat{Q}_H(t),\hat{H}]$$

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(t)}{\partial t}=\underline{\hat H}\Psi(t),\qquad \boxed{i\hbar\frac{d\hat Q_H(t)}{dt}=[\hat Q_H(t),\hat H]}\rightarrow \text{ур-е Гайзенберга}$$

в гайзенб. предст. $\hat H$ от вр. не зависит, как и в шредит. предст.

4.3. Представление взаимодействия

рассм. физ. сист, сост. из 2-х и > частиц, взаимод. между собой

$$\hat H=\underbrace{\hat H_0}_{\text{без учета взаимод}}+\underbrace{\hat V}_{\text{учет взаимод. между част. сист.}}\qquad \underbrace{\Psi_I(t)=\hat R_0^{-1}(t,t_0)\Psi_S(t)}_{I\text{ - interaction}} \ (*),\qquad i\hbar\frac{\partial\hat R_0(t,t_0)}{\partial t}=\hat H_0\hat R_0(t,t_0)$$

$$\hat R_0(t,t_0)=\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat H_0\right]$$

рав-во (*) продиф. по t и $|\cdot i\hbar \Rightarrow$ $i\hbar\frac{\partial\Psi_I(t)}{\partial t}=i\hbar\frac{\partial\hat R_0^{-1}}{\partial t}\Psi_S(t)+i\hbar\hat R_0^{-1}\frac{\partial\Psi_S(t)}{\partial t}=$

$$=\left|\ \frac{\partial}{\partial t}(\hat R_0^{-1}\hat R_0)=0\qquad i\hbar\frac{\partial\hat R_0^{-1}}{\partial t}=-\hat R_0^{-1}\hat H_0\ \right|=-\hat R_0^{-1}\hat H_0\Psi_S(t)+\hat R^{-1}\hat H\Psi_S(t)=$$

$$=-\cancel{\hat R_0^{-1}\hat H\Psi_S(t)}+\cancel{\hat R_0^{-1}\hat H_0\Psi_S(t)}+\hat R_0^{-1}\hat V\,\hat R_0\hat R_0^{-1}\Psi_S(t)\qquad i\hbar\frac{\partial\Psi_I(t)}{\partial t}=\hat V_I(t)\Psi_I(t)$$

$$\boxed{\hat V_I(t)=\hat R_0^{-1}(t,t_0)\hat V\hat R(t,t_0)}$$

взаимодействие в представл. взаимодействия

$$\hat Q_I(t)=\hat R_0^{-1}(t,t_0)\hat Q_S\hat R_0(t,t_0)$$

$$\boxed{i\hbar\frac{d\hat Q_I(t)}{dt}=[\hat Q_I(t),\hat H]}$$

§5. Представление чисел заполнения для гармонич. осцил.

$\Psi_n(\xi) = \langle \xi | n \rangle$, $|n\rangle$ n - число квантов колебания (фононов)

фонон - квант колеб., квазичастица

энерг. 1 фонона $= \hbar\omega$

состояние осциллятора опред. числом фононов

$n=1$ - однофононное сост.

$n=2$ двухфононное

$\hat a |n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ опер. $\hat a$ ↓ число фононов на единицу

$\hat a^+ |n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ ↑ на единицу

$\hat a$ - оператор уничтожения фононов

$\hat a^+$ - опер-р рождения фононов $\quad [\hat a, \hat a^+] = 1 \;\Big|\; \hat n = \hat a^+ \hat a |n\rangle = n|n\rangle$

$\boxed{\hat n = \hat a^+ \hat a}$ - опер-р числа фононов

$|0\rangle$ - состояние наз. вакуум (нет фононов)

$\hat H = \hbar\omega(\hat a^+ \hat a + \frac{1}{2}) = \hbar\omega(\hat n + \frac{1}{2})$

$\langle 0|0\rangle = 1$, $\langle n|n\rangle = 1$ $\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}$

нормир-е условия

$\boxed{\hat a|0\rangle = 0}$ вакуум

$\langle 0|\hat H|0\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega$ - энерг. нулевых колебаний

$\hat a|0\rangle = 0$ ур-е для опред. вект сост. с нулем

$$\boxed{|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat a^+)^n|0\rangle}$$

операторы $\hat a$, $\hat a^+$ не диаг. в этом представл. Это предст. наз. предст. чисел заполнения

def: Переход от коорд. предст. к предст. чисел заполн. наз. вторичное квантование

$\hat a_{n-1,n} = \sqrt{n}$, $\hat a^+_{n+1,n} = \sqrt{n+1}$ — отличные от нуля матр. элементы

$$\hat a = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \end{pmatrix} \qquad \hat a^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & \dots & \end{pmatrix} \qquad \hat n = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 2 & \dots \end{pmatrix}$$

опер-р уничтожения $\qquad$ опер-р рождения $\qquad$ опер. числа фононов

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$ - этот столбец подразумевает матрицу

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|2\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \dots \\ 1 & 0 & 0 & \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

10.04.12.

Теория возмущений глава 7.

§1. Возмущения, не зависящие от времени

приближ. методы решений кв. мех. задач

$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ пусть мы знаем точное реш-е для гамильт. $\hat{H}_0$

$\hat{V}$ - возмущение, малая поправка

Используем итерац. процедуру. Спектр дискр. невырожденный

$\boxed{\hat{H}_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}}$ - невозмущ. уравнение $E_n^{(0)}, \psi_n^{(0)}$ - невозмущ. велич.

$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$ $(\hat{H}_0 + \hat{V})\psi_n = E_n\psi_n$ будем искать E_n, ψ_n в виде: разложения в ряд

$\psi_n = \sum_m \psi_n^{(m)}$, $E_n = \sum_m E_n^{(m)}$

$\hat{V}$ - малая величина $\psi_n^{(1)}, E_n^{(1)}$ - линейные величины по возмущению

$\psi_n^{(2)}, E_n^{(2)}$ - квадр. велич. по возмущению

Теория возмущений Рэлея - Шредингера:

$E_n^{(1)}, \psi_n^{(1)}$ - найдем лин. поправки по возмущению ф-ции $\psi_n^{(0)}$ сост. полную (ортонорм) сист. ф-й. По эт. набору можно разложить $\forall$ ф-ю ($\hat{H}_0$ - эрмитов).

$$\psi_n^{(1)} = \sum_m C_{mn}^{(1)} \psi_m^{(0)} \qquad \left.\begin{aligned}\psi_n &= \psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)} \\ E_n &= E_n^{(0)} + E_n^{(1)}\end{aligned}\right\} \to (\hat{H}_0 + \hat{V})\psi_n = E_n \psi_n$$

$$(\hat{H}_0 + \hat{V})(\psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)}) = (E_n^{(0)} + E_n^{(1)})(\psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)})$$

$E_n^{(1)}\psi_n^{(1)}$ - 2 пор. малости по возмущению
$\hat{V}\psi_n^{(1)}$ - не пишем! 2 пор. малости опускаем

$$\underline{\hat{H}_0\psi_n^{(0)}} + \hat{H}_0\psi_n^{(1)} + \hat{V}\psi_n^{(0)} = \underline{E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}} + E_n^{(0)}\psi_n^{(1)} + E_n^{(1)}\psi_n^{(0)}$$

$\hat{H}_0\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}$ - невозмущ. ур. Шр.

$$\psi_n^{(0)*} \Big| \sum_m C_{mn}^{(1)} E_m^{(0)} \psi_m^{(0)} + \hat{V}\psi_n^{(0)} = + E_n^{(0)} \sum_m C_{mn}^{(1)} \psi_m^{(0)} + E_n^{(1)} \psi_n^{(0)} \Big\} \; k \neq n$$

$$\int dq\, \psi_n^{(0)*} \psi_m^{(0)} = \delta_{nm} \qquad V_{nm} = \int dq\, \psi_n^{(0)*} \psi_m^{(0)}$$

$$\cancel{C_{nn}^{(1)} E_n^{(0)}} + V_{nn} = \cancel{C_{nn}^{(1)} E_n^{(0)}} + E_n^{(1)} \qquad \boxed{E_n^{(1)} = V_{nn}}$$

первая поправка к энергии есть диаг. матр. эл. по возмущ.

умнож. $\psi_k^{(0)*}$ $k \neq n$

в силу ортогон. в.ф. эт. член не дает вклада

$$C_{kn}^{(1)} E_k^{(0)} + V_{kn} = E_n^{(0)} C_{kn}^{(1)}$$

значит $m \neq n$

$$C_{kn}^{(1)} = \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \qquad \boxed{\psi_n^{(1)} = \sum_m{}' \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)}}$$

$' \to m \neq n$

первая поправка к в.ф. опред. не диаг. эл-м

$$C_{nn}^{(1)} - ? \qquad \psi_n = \psi_n^{(0)} + C_{nn}^{(1)}\psi_n^{(0)} + \sum_m{}' \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)} \qquad \int dq\, \psi_n^* \psi_n = 1$$

в.ф. д.б. норм. с точн. до мн. чл. по возм.

при $\int$ 0

$$|\psi_n|^2 = |\psi_n^{(0)}|^2 + 2\,\mathrm{Re}\, C_{nn}^{(1)} |\psi_n^{(0)}|^2 + \cancel{\psi_n^{(0)*} \sum_m{}' \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)}}$$

опер. гамильт. эрмит. (диаг. эл-в вещ-е)

мн. часть $= 0$

$$1 + 2\,\underset{0}{\mathrm{Re}\, C_{nn}^{(1)}} = 1 \Rightarrow \boxed{C_{nn}^{(1)} = 0}$$

$\mathrm{Re}\, C_{nn}^{(1)} = 0$

$\boxed{C_{nn}^{(1)} = 0}$

Условия применимости:

$$\frac{V_{nm}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_n^{(0)}$$

чтобы поправка была малой д. б. мал коэф. при в. ф

$$|\psi_n^{(1)}| \ll |\psi_n^{(0)}| \quad \Rightarrow \quad \underline{\underline{|V_{nm}| \ll |E_n^{(0)} - E_m^{(0)}|, \quad |V_{nn}| \ll |E_n^{(0)}|}} \quad !$$

Определите 2-ю поправку к энергии:

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} \qquad \psi_n = \psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)} \qquad (\hat{H}_0 + \hat{V})\psi_n = E_n \psi_n$$

$$\int \psi_n^{(0)*} \cdot \Big\{ \underline{\hat{H}_0 \psi_n^{(0)}} + \sum_m{}' C_{mn}^{(1)} E_m^{(0)} \psi_m^{(0)} + \hat{V}\psi_n^{(0)} + \hat{V} \sum_m C_{mn}^{(1)} \psi_m^{(0)} = \underline{E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}} + E_n^{(0)} \sum_m{}' C_{mn}^{(1)} \psi_m^{(0)} +$$

$$+ E_n^{(1)} \psi_n^{(0)} + E_n^{(1)} \sum_m{}' C_{mn}^{(1)} \psi_m^{(0)} + E_n^{(2)} \psi_n^{(0)}$$

$\sim$ - в силу ур. с точн. до мал. чл.

$$\sum_m{}' C_{mn}^{(1)} V_{nn} = E_n^{(2)}$$

$$\boxed{E_n^{(2)} = \sum_m{}' \frac{|V_{nm}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}}$$

вторая поправка по теор. возмущ. к эн. осн. сост. всегда отриц.

$$C_{mn}^{(1)} = \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \qquad V_{mn} = V_{nm}^*$$

§2. Секулярное уравнение

для вырожденных сост-й — собств. зн. эн. вырожд. $\hat{H}_0 \psi_{ni}^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_{ni}^{(0)}$

ψ_{ni} - волн. ф., относ. к вырожд. сост. кр. вырожд. S $\quad \boxed{1 \leq i \leq S}$

одной энергии соотв. S волн. ф-й

ψ_{ni} - не возмущенные волн. ф. соотв. $E_n^{(0)}$ диск. спектра кр. S

$$\psi_{ni}^{(0)} = \sum_j b_{ij} \psi_{nj}^{(0)} \qquad \hat{H}_0 \psi_{ni}^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_{ni}^{(0)}$$

$$(\hat{H}_0 + \hat{V})\psi_{ni} = E_n \psi_{ni}, \quad E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} \quad \psi_{ni} = \psi_{ni}^{(0)} + \psi_{ni}^{(1)}$$

ур-е с возмущением

$$\underbrace{\int \psi_{nk}^{(0)*} \cdot \Big| [\hat{H}_0 - E_n^{(0)}]\psi_{ni}^{(1)}}_{\text{лев. ч. ур.}} = E_n^{(1)}\psi_{ni}^{(0)} - \hat{V}\psi_{ni}^{(0)} \qquad \psi_{ni}^{(1)} = \sum_{m,l} C_{ml,ni}^{(1)} \psi_{ml}^{(0)}$$

$$\int dq\, \psi_{nk}^{(0)*} [\hat{H}_0 - E_n^{(0)}]\psi_{ni}^{(1)} = \sum_{m,l} C_{ml,ni}^{(1)} \int dq\, \psi_{nk}^{(0)*} [\hat{H}_0 - E_n^{(0)}]\psi_{ml}^{(0)} =$$

$$= \sum_{m,l} C_{ml,ni}^{(1)} \underbrace{(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})}_{m=n\ =0} \underbrace{\int dq\, \psi_{nk}^{(0)*}\psi_{ml}^{(0)}}_{m\neq 0\ =0} = 0$$

$$\hat{H}_0 \psi_{ml} = E_m^{(0)} \psi_{ml}^{(0)} \qquad \left[\begin{array}{ll} \text{if } m \neq n & \int = 0 \\ \text{if } m = n & E_m^{(0)} = E_n^{(0)} \end{array}\right.$$

$\psi_{nk}^{(0)*}$ ортогональна к лев. части ур-я $\Rightarrow$ д.б. ортогон. и к пр. части ур. (это не всегда, разное $\hat{V}$)

Нужно сделать такой выбор нулевых ф-й, чтобы они были ортог. к пр.ч.ур.

$$\psi_{ni}^{(0)} = \sum_j b_{ij} \psi_{nj}^{(0)}$$ нужно выбр. коэф. b_{ij} - унитарная матрица

$$\int \psi_{nk}^{(0)*} \cdot \Big| E_n^{(1)} \psi_{ni}^{(0)} - \hat{V}\psi_{ni}^{(0)} = \sum_j \Big\{ \underline{\int dq\, \psi_{nk}^{(0)*} \hat{V} \psi_{nj}^{(0)}} - E_n^{(1)} \delta_{kj} \Big\} b_{ij} = 0$$

$$V_{kj} = \int dq\, \psi_{nk}^{(0)*} \hat{V} \psi_{nj}^{(0)} \qquad \sum_j (V_{kj} - E_n^{(1)} \delta_{kj}) b_{ij} = 0$$

нужно чтобы эта сист. имела нетрив. решение $\Rightarrow$ $\det \stackrel{!}{=} 0$

$$\det \left(V_{kj} - E_n^{(1)} \delta_{kj}\right) = 0$$

$$\begin{vmatrix} V_{11} - E_n^{(1)} & V_{12} & V_{13} & \dots \\ V_{21} & V_{22} - E_n^{(1)} & V_{23} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \end{vmatrix} = 0$$

S строк и столбцов

ур-е S-й степени, относ. $E_n^{(1)}$

реш-е – S разл. значений $E_n^{(1)}$

секулярное (вековое) ур-е

возмущение либо частично, либо полностью снимает вырождение

12.04.12.

§3. Возмущения, зависящие от t

невозмущ. сист. нах. в стац. состоянии $\qquad \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$

$\Psi_n^{(0)}$ - в. ф. стацион. состояния, включая вр. множит. $\qquad \Psi_n(t) = \Psi_n^{(0)} + \Psi_n^{(1)}(t)$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_n(t)}{\partial t} = [\hat{H}_0 + \hat{V}(t)]\Psi_n(t)$$

$$\Psi_n^{(0)} = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n^{(0)} t}\, \psi_n^{(0)}$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_n^{(0)}}{\partial t} = \hat{H}_0 \Psi_n^{(0)}(t) \quad \text{- невозм. ур.}$$

$\psi_n^{(0)}$ - от вр. не зав-т

$$i\hbar \cancel{\frac{\partial \Psi_n^{(0)}}{\partial t}} + i\hbar \frac{\partial \Psi_n^{(1)}(t)}{\partial t} = \cancel{\hat{H}_0 \Psi_n^{(0)}} + \hat{H}_0 \Psi_n^{(1)}(t) + \hat{V}(t)\Psi_n^{(0)}$$

разлож. добавки к в. ф. в ряд по собств. зн. стац. состояния

с точн. до лин. членов

$$\Psi_n^{(1)}(t) = \sum_k a_{kn}^{(1)}(t)\Psi_k^{(0)} \qquad \Psi_m^{(0)*}\Big|\; i\hbar \sum_k \frac{d a_{kn}^{(1)}(t)}{dt}\Psi_k^{(0)} + i\hbar \cancel{\sum_k a_{kn}^{(1)}(t) \frac{\partial \Psi_k^{(0)}}{\partial t}} =$$

$$= \cancel{\sum_k a_{kn}^{(1)}(t) \hat{H}_0 \Psi_k^{(0)}} + \hat{V}(t)\Psi_n^{(0)}$$

$$i\hbar \frac{d a_{mn}^{(1)}(t)}{dt} = V_{mn}(t), \quad V_{mn}(t) = \int dq\, \Psi_m^{(0)*} \hat{V}(t) \Psi_n^{(0)} = \tilde{V}_{mn}(t) e^{i\omega_{mn} t}$$

$$\tilde{V}_{mn}(t) = \int dq\, \psi_m^{(0)} \hat{V}(t) \psi_n^{(0)} \qquad \omega_{mn} = \frac{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}{\hbar}$$

$$a_{mn}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int dt\, V_{mn}(t) \qquad \boxed{a_{mn}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int dt\, \tilde{V}_{mn}(t) e^{i\omega_{mn} t}}$$

Периодич. возмущ. по вр. $\qquad \hat{V}(t) = \hat{F}e^{-i\omega t} + \hat{G}e^{i\omega t}, \qquad \hat{V}^{+}(t) = \hat{V}(t)$

д. быть, т.к гамильт. эрмитов

$$\hat{F}^{+} e^{i\omega t} + \hat{G}^{+} e^{-i\omega t} = \hat{F}e^{-i\omega t} + \hat{G}e^{i\omega t}, \quad \boxed{\hat{F} = \hat{G}^{+}}.$$

$$\boxed{F_{mn} = G_{nm}^{*}}$$

$$V_{mn}(t) = \tilde{V}_{mn}(t) e^{i\omega_{mn} t} = F_{mn} e^{i(\omega_{mn} - \omega)t} + F_{nm}^{*} e^{i(\omega_{mn} + \omega)t}$$

$$a_{mn}^{(1)}(t) = -\frac{F_{mn} e^{i(\omega_{mn} - \omega)t}}{\hbar(\omega_{mn} - \omega)} - \frac{F_{nm}^{*} e^{i(\omega_{mn} + \omega)t}}{\hbar(\omega_{mn} + \omega)}$$

$\Psi_n^{(1)}$ д.б. мала по ср. с невозм. в-ф.

$|E_m^{(0)} - E_n^{(0)} \pm \omega\hbar| << |F_{mn}|$

§4. Переходы в непр. спектре

возмущение вида $\hat{V}(t) = \hat{V} e^{\eta t}$ экспоненц. нараст. возмущение

адиабатическое возмущение $(\eta \to 0)$ $\hat{V}$ - от вр не зав-т

$$V_{mn}(t) = \underbrace{\tilde{V}_{mn}}_{\text{от вр. не зав.}} e^{i\omega_{mn}t + \eta t} \qquad a_{mn}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt\, V_{mn}(t) = \frac{\tilde{V}_{mn} e^{i\omega_{mn}t+\eta t}}{\hbar(\omega_{mn} - i\eta)}$$

t - текущий мом. вр.

возмущение включ. в беск. далекий мом. вр $t = -\infty$

$$|a_{mn}^{(1)}(t)|^2 = \frac{|\tilde{V}_{nm}|^2 e^{2\eta t}}{\hbar^2(\omega_{mn}^2 + \eta^2)}, \qquad \frac{dW_{mn}}{d\nu_m} = \lim_{\eta \to 0} \frac{d}{dt} |a_{mn}^{(1)}(t)|^2 =$$

W_{mn} - вероятность, завис. от вр.

вероятн. перехода из сост. m в сост. n

$$= \lim_{\eta \to 0} |\tilde{V}_{nm}|^2 \cdot \frac{2\eta e^{2\eta t}}{\hbar^2(\omega_{mn}^2 + \eta^2)} \qquad \lim_{\eta \to 0} \frac{\eta}{\omega_{mn}^2 + \eta^2} = \pi\delta(\omega_{mn})$$

$d\nu_m = \rho(E_m)\, dE_m$ $\rho(E_m)$ - плотность конечных состояний в интервале $(E_m, E_m + dE_m)$

$$\boxed{dW_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar} |\tilde{V}_{mn}|^2 \delta(E_m - E_n)\, dE_m\, \rho(E_m)}$$

вероятность перехода

δ-ф. выражает з-н сохр. энерг.

дифференц. вер. перехода

$$\boxed{W_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar} |\tilde{V}_{mn}|^2 \rho(E_n)}$$

Энрико Ферми получил золотое пр-ло Ферми

полная вер-ть перех. в ед. вр из нач. сост. n в кон. сост. m

$$\Psi_n(t) = \Psi_n^{(0)} + \Psi_n^{(1)}, \qquad \Psi_n^{(1)}(t) = \sum_k a_{kn}^{(1)}(t)\Psi_n^{(0)}$$

$$\Psi_n(t) = \Psi_n^{(0)} + \sum_k a_{kn}^{(1)}(t)\Psi_k^{(0)} \qquad \Psi_n^{(0)} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n^{(0)}t\right)\psi_n^{(0)}$$

$$\Psi_n(t) = \Psi_n^{(0)} + \int d\nu_k\, a_{kn}^{(1)}(t)\Psi_k^{(0)} = \psi_n^{(0)} - \int \frac{d\nu_k \hat{V}_{kn}\Psi_k^{(0)}}{\hbar(\omega_{kn}-i\eta)} e^{i\omega_{kn}t} =$$

$$\omega_{kn} = \frac{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}}{\hbar} \qquad = \left[\psi_n^{(0)} + \int \frac{d\nu_k \hat{V}_{kn}\psi_k^{(0)}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)} + i\cdot 0}\right] e^{-\frac{i}{\hbar}E_n^{(0)}t}$$

$(\eta \to 0)$

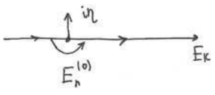
пр-ло обхода полюса (обход снизу)

$$\left\{ e^{\frac{i}{\hbar}(E_k^{(0)} - E_n^{(0)})t} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}E_k^{(0)}t} \right\}$$

$d\nu_k = \rho(E_k)\,dE_k$

интегр. идет по энергии $\left| -i0 \cdot \right.$ обход сверху $\left. \right|$

добавка $i\eta$ смещ. полюс в верхн. полуплоскость



глава 8. Квазиклассическое приближение

требует использ. теории возмущений

§1. Волн. ф. в квазикласс. случае

стацион. ур. Шредингера $\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + [E - U]\psi = 0$

$$\Psi = a e^{\frac{i}{\hbar}S} \qquad \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 - \frac{i\hbar}{2m}\Delta S = E - U \qquad \hbar = 0$$

ур. Гамильтона-Якоби (при $\hbar \to 0$)

Наша задача найти поправки. Будем иск. реш. в виде ряда теории возмущений: $S = S_0 + \frac{\hbar}{i}S_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_2 + \dots$

Одномерн. случай: $U \equiv U(x)$, $S = S(x)$

$$\frac{1}{2m} S'^2(x) - \frac{i\hbar}{2m} S''(x) = E - U(x) \qquad S = S_0(x)$$

$$S_0'(x) = \pm\sqrt{2m(E-U(x))} \qquad S_0(x) = \pm\int dx \sqrt{2m(E-U(x))} = \pm\int dx\, p(x)$$

$p(x) = \sqrt{2m(E-U(x))}$ - класс. импульс

Какова точность такого приближения? $\left|\frac{\hbar S''}{S'^2}\right| \ll 1$, $\left|\frac{d}{dx}\frac{\hbar}{S'}\right| \ll 1$

$S = S_0$

$|S'| = |p|$ $\quad \underbrace{\left|\frac{d\lambda}{dx}\right| \ll 1} \quad \lambda = \frac{\hbar}{p}$

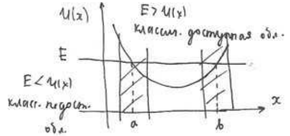
Изменение дл. волны на расст-х порядка ее самой д.б < 1

$\lambda \to 0$ геом. опт. приближение $\qquad \frac{dp}{dx} = \frac{2m\left(-\frac{dU}{dx}\right)}{2\sqrt{2m(E-U)}} = \frac{mF}{p}$

$\left|\frac{d\lambda}{dx}\right| = \left|\frac{\hbar}{p^2}\frac{dp}{dx}\right| = \frac{\hbar m|F|}{|p|^3} \ll 1 \qquad \boxed{\frac{\hbar m|F|}{|p|^3} \ll 1}$ усл. применимости квазикласс. приближ.

17.04.12.

$S_0(x) = \pm\int dx\, p(x)$, $\quad \frac{m\hbar|F|}{|p^3|} \ll 1$ $\quad$ 1) вблизи точек, где импульс обращ. в 0 квазикласс. приближ. не применимо



в т. a и b импульс меняет знак, обращ. в 0 - это точки поворота

в окрестности этих т. квазиклас. ≈ не применимо!

2) $F = -\frac{dU(x)}{dx}$, if сила очень большая - квазикласс. ≈ не применимо

Найдём следующее приближ. $S(x)$:

$S(x) = S_0(x) + \frac{\hbar}{i} S_1(x) \to$ в ур. Шр. $\quad S_0'(x)\, S_1'(x) + \frac{1}{2} S_0''(x) = 0 \quad$ с точн. до мин. ч.

$$S_1'(x) = -\frac{S_0''(x)}{2 S_0'(x)}, \quad S_0'(x) = \pm p(x) \qquad S_1'(x) = -\frac{p'(x)}{2p(x)}$$

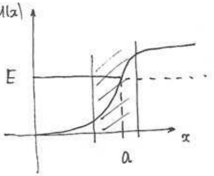
$$S_1(x) = -\frac{1}{2}\ln|p(x)| + \ln C = \ln\frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} + \ln C \qquad p(x) = \sqrt{2m(E-U(x))}$$

$$\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int dx\, p(x)\right] + \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int dx\, p(x)\right] \to$$ в. ф. в квазиклас. приближении

в подбарьерной обл-ти нужно выбросить экспон. уб. член

$$\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int dx|p(x)|\right] + \frac{C_2}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left[\frac{1}{\hbar}\int dx|p(x)|\right], \quad E < U(x)$$

класс. недоступная область



$p(x) = \sqrt{2m(E-U(x))}$ находимся вблизи т. поворота (т. a)

вблизи т. a – т. поворота – импульс мал,

E близка к $U(x)$.

Можем разложить в ряд: $|E - U(x)| \approx |x-a||F_0|, \quad F_0 = -\left.\frac{dU(x)}{dx}\right|_{x=a}$

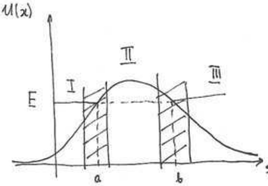
$|p(x)| = \sqrt{2m|F_0||x-a|}, \quad |p| \gg \underline{(m\hbar|F_0|)^{1/3} = p_0}$

$(2m|F_0||x-a|)^{1/2} \gg (m\hbar|F_0|)^{1/3}, \quad |x-a| \gg \frac{\hbar}{2(m\hbar|F_0|)^{1/3}} = \frac{\hbar}{2p_0}, \quad \boxed{|x-a| \gg \frac{\lambda_0}{2}}$

$\frac{\hbar}{p_0} = \lambda_0, \quad \frac{\hbar}{p} = \lambda, \quad p \gg p_0 \quad \lambda \ll \lambda_0 \quad |x-a| \gg \lambda$

на расст. на которых укладывается много длин волн необх. отойти от т. поворота, чтобы польз. квазиклас. приближ.

§5. Прохождение через потенц. барьер

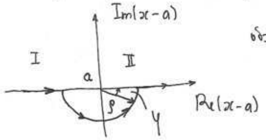


Хотим проследить изменение в.ф. при переходе из I обл. в III.

Не можем использ. сшивку в.ф. в т. a, b

$\rho = |x-a|$ · расст. на кот. мы можем подойти к т. поворота

Приблизимся к т. поворота на расст., на кот. можем использ. квазиклас. ≈



обходим т. a по комплексн. плоскости

Обход по нижней полуплоскости.

Нам нужно чтобы в.ф. экспон. затухала

if по верхн. полуплоск. - то в.ф. будет экспон. возр.

$\rho = |x-a|$ (I) $\boxed{a - x = \rho e^{i\varphi}}$, $-\pi < \varphi < 0$, $E - U(x) \approx (a-x)|F_0|$,

$$\psi_I(x) = \frac{C}{\sqrt{p}} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_x^a dx\, p(x) + \frac{i\pi}{4}\right], \quad x < a \qquad F_0 = -\left.\frac{dU(x)}{dx}\right|_{x=a} < 0$$

чтобы пл.пот. была напр. →

$$\psi_I(x) = \frac{C}{[2m(a-x)|F_0|]^{1/4}} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m}\int_x^a dx\,[(a-x)|F_0|]^{1/2} + \frac{i\pi}{4}\right], \quad x < a$$

$$\int_x^a dx\,(a-x)^{1/2} = \frac{2}{3}(a-x)^{3/2} = \left\{ a - x = \rho e^{i\varphi} \right\} = \frac{2}{3}\underbrace{\rho^{3/2} e^{\frac{3i\varphi}{2}}}\cdot \underbrace{e^{-\frac{3i\varphi}{2}}}_{\text{в I обл. при } \varphi = -\pi} = \frac{2}{3}\rho^{3/2} e^{\frac{3i\varphi}{2}} e^{\frac{3i\pi}{2}} =$$

$$= \underbrace{-\frac{2i}{3}\rho^{3/2} e^{\frac{3i\varphi}{2}}}_{\substack{\text{I} \\ \varphi = -\pi}} \longrightarrow \underbrace{-\frac{2i}{3}\rho^{3/2}}_{\text{II} \;\; \varphi = 0} = \underbrace{-\frac{2i}{3}(x-a)^{3/2}}_{\substack{\text{II} \\ x > a}} = -i\int_a^x dx\,(x-a)^{1/2}$$

$$\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_a^x dx\,|p(x)| + \frac{i\pi}{4}\right] \quad \text{затухающая exp}$$

$p(x)=\sqrt{2m|F_0|(x-a)}$ $\qquad\qquad \varphi=-\pi$ в I обл.

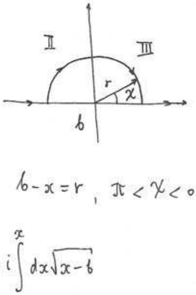
$$(2m(a-x)|F_0|)^{1/4} = (2m|F_0|)^{1/4}\cdot\rho^{1/4}\underbrace{e^{\frac{i\varphi}{4}}e^{-\frac{i\varphi}{4}}} = \underbrace{(2m|F_0|)^{1/4}e^{\frac{i\pi}{4}}\rho^{1/4}e^{\frac{i\varphi}{4}}}_{} \to$$

$$\to \underbrace{(2m|F_0|)^{1/4}e^{\frac{i\pi}{4}}\rho^{1/4}}_{II} = [2m|F_0|(x-a)]^{1/4}e^{\frac{i\pi}{4}} \approx \sqrt{|p(x)|}\,e^{\frac{i\pi}{4}} \quad I$$

$$\psi_{II}(x)=\frac{C}{\sqrt{|p(x)|}}\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_a^x dx|p(x)|\right] \to$$ в.ф. во II обл. вблизи т. поворота $\underline{a}$

Эта в.ф. справедлива во всей II обл. Я хочу написать ее вблизи т. $\underline{b}$

$$\psi_{II}(x)=\frac{C}{\sqrt{|p(x)|}}\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_a^b dx|p(x)|\right]\exp\left[+\frac{1}{\hbar}\int_x^b dx|p(x)|\right]$$



$$|U(x)-E|\approx(b-x)|\tilde{F}_0|, \qquad \tilde{F}_0=-\frac{dU(x)}{dx}\bigg|_{x=b}$$

$$\int_x^b dx(b-x)^{\frac{1}{2}}=\frac{2}{3}(b-x)^{3/2}=\frac{2}{3}r^{3/2}e^{\frac{3i\chi}{2}}\cdot e^{-\frac{3i\chi}{2}}= \qquad \chi=\pi$$

$b-x=r,\ \pi<\chi<0$ $$=\underbrace{\frac{2i}{3}r^{3/2}e^{\frac{3i\chi}{2}}}_{II}\to\underbrace{\frac{2i}{3}r^{3/2}}_{III}=\frac{2i}{3}(x-b)^{3/2}=$$

$$=i\int_b^x dx\sqrt{x-b}$$

в квазиклас. ≈ амплитуда отраж. от барьера совпад. с амплит. пад. волны. При $E>U(x)$ есть комплексные т. поворота (надбарьерное отраж.) → комплексные траектории

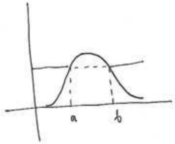
$$\frac{C}{\sqrt{p(x)}}\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_a^b dx|p(x)|\right]\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_b^x dx\,p(x)+\frac{i\pi}{4}\right]=\psi_{III}(x)$$

$$D=\frac{|\vec{j}_{прош}|}{|\vec{j}_{пад}|}=D_0\cdot\exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_a^b dx|p(x)|\right]\to$$ Коэф. прохожд. потенц. барьера в квазиклас. ≈

коэф. прох.

19.04.12.

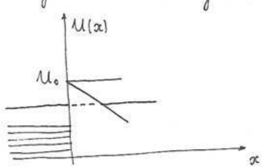
$$D = D_0 \cdot \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_a^b dx\,|p(x)|\right]$$



§6. Холодная эмиссия $\bar{e}$ из Met

к Met прикладываем электр. поле $\mathcal{E} \sim 10^6 \frac{В}{см}$ дост. сильное поле

модель металла на языке кв. мех:



$$U_{эфф}(x) = \begin{cases} 0, & x<0 \\ U_0 - e\mathcal{E}x, & x>0 \end{cases}$$

точки поворота:

$a: \ x_1 = 0$

$b: \ x_2 = \dfrac{U_0 - E}{e\mathcal{E}}$

ток в холодной эмиссии $\bar{e}$ из Met

$$D = D_0 \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_0^{x_2} dx\sqrt{2m[U(x)-E]}\right] = D_0\cdot\exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_0^{x_0} dx\sqrt{2m[U_0 - E - e\mathcal{E}x]}\right] =$$

$$= D_0\cdot\exp\left[-\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar}\int_0^{x_2} dx\sqrt{(U_0-E)\left[1-\frac{e\mathcal{E}}{U_0-E}\cdot x\right]}\right] = D_0\cdot\exp\left[-\frac{2\sqrt{2m}\sqrt{(U_0-E)}}{\hbar}\int_0^{x_2} dx\sqrt{1-\frac{x}{x_2}}\right] =$$

$$= \left\{x = x_2 u\right\} = D_0\cdot\exp\left[-\frac{2\sqrt{2m}\,(U_0-E)^{3/2}}{\hbar e\mathcal{E}}\cdot\int_0^1 du\sqrt{1-u}\right] = D_0\cdot\exp\left[-\frac{4\sqrt{2m}\,(U_0-E)^{3/2}}{3\hbar e\mathcal{E}}\right]$$

$\langle D(\mathcal{E})\rangle = \langle D_0\rangle \exp\left[-\dfrac{\mathcal{E}_0}{\mathcal{E}}\right]$ $\qquad I(\mathcal{E}) = J_0\cdot\langle D(\mathcal{E})\rangle$ ток холодной эмиссии

усредним по энергии

$$\boxed{I(\mathcal{E}) = A\cdot\exp\left(-\frac{\mathcal{E}_0}{\mathcal{E}}\right)}$$

с помощью кв. мех. опред. макроскопич. эфф.

§ 7. Теория α-распада

З-н радиоакт. распада: $dN(t) = -\lambda N(t)\,dt \longrightarrow \boxed{N(t) = N_0 e^{-\lambda t}}$
(статист. з-н)

ансамбль радиоакт. ядер

число ядер убывает со вр.

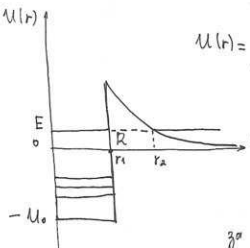
N_0 - число ядер в нач. мом. вр. t_0

λ - постоянная распада

период полураспада: время, за которое кол-во первонач. ядер ↓ в 2 раза

$$N_0 e^{-\lambda t_{1/2}} = \frac{1}{2} N_0 \qquad \boxed{t_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda}}$$

Среднее время жизни 1 ядра: $\langle t \rangle = \dfrac{\int_0^\infty dt \cdot t\, N(t)}{\int_0^\infty dt\, N(t)} = \dfrac{1}{\lambda}$



$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & r < R \\ \dfrac{2e^2(Z-2)}{r}, & r > R \end{cases}$$

заряд ядра Ze

α-част. $2e$

за счет флуктуации α-част. попадает в обл. положит. $U(r)$, за счет туннельн. эфф. проходит барьер

$\boxed{\lambda = n\, D}$

(c^{-1}) — безразм. велич.

n → число соудар. α-част. с барьером в ед. вр.

Определим n: считаем, что α-част. внутри ямы движ. со скор. v_0

$n \sim \dfrac{v_0}{R}$ R - радиус ямы, радиус ядра

скорость оценим с помощью соотн. неопред. -й:

$p_0 = m v_0 \qquad m v_0 R \sim \hbar, \quad v_0 \sim \dfrac{\hbar}{mR}, \quad \boxed{n \sim \dfrac{\hbar}{mR^2}}$

Ландау: $n = \frac{\langle \Delta E \rangle}{2\pi\hbar}$ — $\langle \Delta E \rangle$ - ср. расстояние между энергет. ур-ми ядра

a: $r_1 = R$

b: $r_2 = \frac{2(Z-2)e^2}{E}$

Гамов

$$D = \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_R^{r_2} dr \sqrt{2m\left[\frac{2(Z-2)e^2}{r} - E\right]}\right] =$$

$$= \exp\left[-\frac{2\sqrt{2mE}}{\hbar}\int_R^{r_2} dr \sqrt{\frac{2(Z-2)e^2}{Er} - 1}\right] =$$

$$= \exp\left[-\frac{2\sqrt{2mE}}{\hbar}\int_R^{r_2} dr \sqrt{\frac{r_2}{r} - 1}\right] = \exp\left[-\frac{2\sqrt{2mE}\, r_2}{\hbar}\int_{\frac{R}{r_2}}^{1} du \sqrt{\frac{1}{u} - 1}\right] =$$

$$= \left\{\begin{array}{l} r = r_2 u \\ u = \sin^2 y \\ du = 2\sin y \cos y\, dy \\ y \Big|_{\arcsin\sqrt{\frac{R}{r_2}} = y_0}^{\frac{\pi}{2}} \end{array}\right\} = \exp\left[-\frac{4\sqrt{2mE}}{\hbar} r_2 \int_{y_0}^{\frac{\pi}{2}} dy \frac{\cancel{\sin y}}{\cancel{\sin y}} \cos y \cos y =\right.$$

$$= \exp\left[-\frac{\overset{2}{\cancel{4}}\sqrt{2mE}\, r_2}{\hbar}\frac{1}{\cancel{2}} r_2 \int_{y_0}^{\frac{\pi}{2}} dy (1 + \cos 2y) =\right.$$

$$= \exp\left[-\frac{2\sqrt{2mE}\, r_2}{\hbar}\left(\frac{\pi}{2} - y_0 - \frac{1}{2}\sin 2y_0\right)\right] \approx \exp\left[-\frac{2\sqrt{2mE}\, r_2}{\hbar}\left(\frac{\pi}{2} - \sqrt{\frac{R}{r_2}} - \frac{1}{2}\cdot 2\sqrt{\frac{R}{r_2}}\right) =\right.$$

предположение $r_2 \gg R \Longrightarrow$ $= \exp\left[-\frac{2\sqrt{2mE}\, r_2}{\hbar}\left(\frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{R}{r_2}}\right)\right.$

$\lambda = nD$ — логарифм должен содержать безразм. величину

$\frac{\lambda}{n} = \frac{\lambda m R^2}{\hbar} = D$ $\qquad \ln\left(\frac{mR^2}{\hbar}\lambda\right) = -\frac{2\sqrt{2mE}\, r_2}{\hbar}\left(\frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{R}{r_2}}\right)$ $\qquad t_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda}$

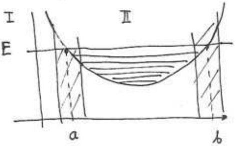
$$\boxed{\ln\left(\frac{\hbar}{mR^2} t_{1/2}\right) = \frac{A}{\sqrt{E}} - B} \qquad A = \frac{2\pi e^2\sqrt{2m}(Z-2)}{\hbar}, \quad B = \frac{8e\sqrt{me(Z-2)}}{\hbar} - \ln\ln 2$$

з-н Гейгера-Неттола (квантово-механическая форма з-на Гейгера-Неттола)

$4\ МэВ < E < 9\ МэВ$ интервал энергии, α-частиц вылетающих при α-распаде

§ 8. Правила квантования Бора-Зоммерфельда

определение уровней энергии в яме квазикласс. $\approx$



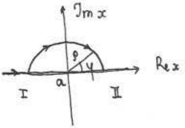
гран. усл. под барьером в.ф. должна exp затухать

дифф. ур. энергии

в.ф. в I обл: $\psi_I(x)=\frac{C}{\sqrt{|p|}}\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_x^a dx\,|p(x)|\right], \quad x<a$

перейти в обл. 2

в яме - стоячая волна, интерф. 2 волн



$$|U(x)-E| \approx F_0(a-x) \quad \mathrm{I} \qquad F_0=-\frac{dU(x)}{dx}\Big|_{x=a}>0$$

$$\psi_I(x)=\frac{C}{[2mF_0(a-x)]^{1/4}}\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_x^a dx\sqrt{2mF_0(a-x)}\right]$$

$$\int_x^a dx\,(a-x)^{1/2} = \frac{2}{3}(a-x)^{\frac{3}{2}} = \frac{2}{3}\rho^{\frac{3}{2}}e^{\frac{3i\varphi}{2}}\cdot\underbrace{e^{-\frac{3i\varphi}{2}}}_{\varphi=\pi} = \frac{2i}{3}\rho^{\frac{3}{2}}e^{\frac{3i\varphi}{2}}\to \qquad e^{-\frac{3i\pi}{2}}=i$$

$0<\varphi<\pi$

$\to \frac{2i}{3}\rho^{\frac{3}{2}}$ в обл. II $\qquad \frac{2i}{3}\rho^{\frac{3}{2}}=\frac{2i}{3}(x-a)^{\frac{3}{2}}=i\int_a^x dx\sqrt{x-a}$

$(\varphi=0)$ $\qquad x>a$ во II обл.

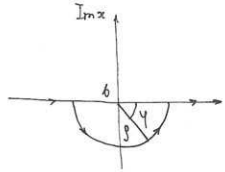
$$\psi_{II}^{(1)}(x)=\frac{C e^{\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{p(x)}}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_a^x dx\,p(x)\right]$$

p - велич. действ.

в.ф. во 2 области волна бегущ. справа налево

(1) по верхн. полуплоск.

$$(a-x)^{-1/4}=\rho^{-1/4}e^{-\frac{i\varphi}{4}}e^{\frac{i\varphi}{4}}=\underset{\mathrm{I}}{\rho^{-\frac{1}{4}}e^{-\frac{i\varphi}{4}}e^{\frac{i\pi}{4}}}\to\rho^{-\frac{1}{4}}e^{\frac{i\pi}{4}}$$



$$-\pi < \varphi < 0$$

$$\int_x^a dx(a-x)^{1/2} = \frac{2}{3}(a-x)^{\frac{3}{2}} = \frac{2}{3}\rho^{\frac{3}{2}} e^{\frac{3i\varphi}{2}} e^{-\frac{3i\varphi}{2}} =$$

$$= -\frac{2i}{3}\rho^{\frac{3}{2}} e^{\frac{3i\varphi}{2}} \underset{\mathrm{I}}{} \longrightarrow -\frac{2i}{3}\rho^{\frac{3}{2}} \underset{\mathrm{II}}{} = -\frac{2i}{3}(x-a)^{3/2} = -i\int_a^x dx(x-a)^{1/2}$$

$$\psi_{\mathrm{II}}^{(2)}(x) = \frac{C e^{-\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{p(x)}} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_a^x dx\, p(x)\right]$$ – волна, бегущая слева направо

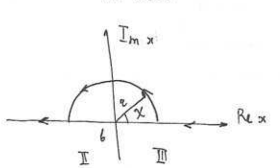
Сложим 2 волны (1) и (2):

$$\psi_{\mathrm{II}}(x) = \frac{2C}{\sqrt{p(x)}} \cos\left[\frac{1}{\hbar}\int_a^x dx\, p(x) - \frac{\pi}{4}\right], \quad x > a$$

$$\psi_{\mathrm{III}}(x) = \frac{C'}{\sqrt{|p|}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_b^x dx|p(x)|\right], \quad x > b$$

$$\psi_{\mathrm{III}}(x) = \frac{C'}{[2m|\tilde{F}_0(x-b)|]^{1/4}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_b^x dx\sqrt{2m|\tilde{F}_0(x-b)|}\right] \quad \mathrm{I}$$

$$\tilde{F}_0 = -\left.\frac{dU(x)}{dx}\right|_{x=b} < 0$$



$$0 < \chi < \pi$$

$$\int_b^x dx(x-b)^{1/2} = \frac{2}{3}(x-b)^{3/2} = \frac{2}{3} r^{\frac{3}{2}} e^{\frac{3i\chi}{2}} \cdot e^{-\frac{3i\chi}{2}} =$$

$\chi = 0$ 1

$$= -\frac{2i}{3} r^{\frac{3}{2}} \underset{\mathrm{II}}{} = -i\int_x^b dx(b-x)^{\frac{1}{2}}$$

$$\varphi_{\mathrm{II}}^{(1)} = \frac{C' e^{-\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{p(x)}} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_x^b dx\, p(x)\right]$$

$$\psi_{\mathrm{II}}^{(2)}(x) = \frac{C' e^{\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{p(x)}} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_x^b dx\, p(x)\right]$$

$$\psi_{III}(x) = \frac{2C'}{\sqrt{p(x)}} \cos\left[\frac{1}{\hbar} \int_x^b dx\, p(x) - \frac{\pi}{4} \right]$$

$\psi_{II}(x) = \psi_{III}(x)$ должны совпадать в $\forall$т. II области

$\psi'_{II}(x) = \psi'_{III}(x)$

$$\frac{C}{\sqrt{p(x)}} \cos\left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x dx\, p(x) - \frac{\pi}{4} \right] - \frac{C'}{\sqrt{p(x)}} \cos\left[\frac{1}{\hbar} \int_x^b dx\, p(x) - \frac{\pi}{4} \right] = 0$$

$$\frac{C}{\sqrt{p(x)}} \sin\left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x dx\, p(x) - \frac{\pi}{4} \right] + \frac{C'}{\sqrt{p(x)}} \sin\left[\frac{1}{\hbar} \int_x^b dx\, p(x) - \frac{\pi}{4} \right] = 0$$

$$\sin\left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x dx\, p(x) - \frac{\pi}{4} \right] \cos\left[\frac{1}{\hbar} \int_x^b dx\, p(x) - \frac{\pi}{4} \right] + \cos\left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x dx\, p(x) - \frac{\pi}{4} \right] \sin\left[\frac{1}{\hbar} \int_x^b dx\, p(x) - \frac{\pi}{4} \right] = 0$$

$$\sin\left[\frac{1}{\hbar} \int_a^b dx\, p(x) - \frac{\pi}{2} \right] = 0$$

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b dx\, p(x) - \frac{\pi}{2} = n\pi \qquad n = 0, 1, 2, \dots$$ — главное кв. число

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b dx\, p(x) = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi, \quad \boxed{\frac{1}{2\pi\hbar} \oint dx\, p(x) = n + \frac{1}{2}} \qquad \oint dx\, p(x) = 2 \int_a^b dx\, p(x)$$

$$\int_a^b + \int_b^a$$

правило квантования Бора-Зоммерфельда

Оценим $\int$ с помощью теор. о среднем

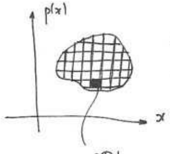
$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b dx\, p(x) = \frac{(b-a)}{\hbar} \langle p \rangle = \left\{ \frac{\langle p \rangle}{\hbar} = \frac{1}{\langle \lambda \rangle} \right\} = \frac{b-a}{\langle \lambda \rangle} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi$$

ср. зн. дл. волны

$n \gg 1$ на интерв. $(b-a)$ должно уклад. много длин волн

$\oint dx\, p(x)$

Число состояний, отнесенное к элем. V физ. пр-ва есть число клеток



интеграл по замкн. обл. в физ. пр-ве

$2\pi\hbar$ - площадь одной клетки

$$\Delta\nu = \frac{\Delta x \cdot \Delta p_x}{2\pi\hbar},$$ одном. случай

число сост.

$$\Delta\nu = \frac{\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z \cdot \Delta p_x \cdot \Delta p_y \cdot \Delta p_z}{(2\pi\hbar)^3}$$

3 мерн. случай

S-мерный случай

$$\Delta\nu = \frac{\Delta q_1 \Delta q_2 \cdot \ldots \cdot \Delta q_s \cdot \Delta p_1 \Delta p_2 \cdot \ldots \cdot \Delta p_s}{(2\pi\hbar)^s}$$

$$d\nu = \frac{dx\, dp_x}{2\pi\hbar}, \quad d\nu = \frac{dx\, dy\, dz\, dp_x\, dp_y\, dp_z}{(2\pi\hbar)^3}, \quad d\nu = \frac{d^s q\, d^s p}{(2\pi\hbar)^s}$$

$$\oint dx\, p(x) = 2\pi\hbar(n + \tfrac{1}{2})$$ n - квазинепрерывная велич.

$$\oint dx \frac{dp(x)}{dn} = 2\pi\hbar, \qquad \frac{dp}{dn} = \frac{dp}{dE} \cdot \underbrace{\frac{dE}{dn}}_{\text{ср. расст. между уровнями}} = \Delta E$$

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

$$\frac{dE}{dp} = \frac{p}{m} = v \qquad \frac{dp}{dE} = \frac{1}{v},$$ где v - скорость част.

$$\oint \frac{dx}{v(x)} = T$$ - период квазиклас. движения $T = \frac{2\pi}{\omega}$

$$\boxed{\Delta E = \hbar\omega}$$

уровни эквидистантны, расст. между ними одинаково в квазиклас. $\approx$

Пронормируем в. ф. в яме

$\tilde{C}$ - нормир. const

$$\int_a^b dx|\psi(x)|^2 = \tilde{C}^2 \int_a^b \frac{dx}{p(x)} \cdot \cos^2\left[\frac{1}{\hbar}\int_a^x dx\, p(x) - \frac{\pi}{4}\right] = 1$$

$\cos^2$ – быстро осциллирующая ф-я (n большое)

дискр. спектр

заменим $\cos^2$ его ср. знач. т.е. $\frac{1}{2}$

$$\frac{\tilde{C}^2}{2}\int_a^b \frac{dx}{p(x)} = \frac{\tilde{C}^2}{2m}\cdot\underbrace{\int_a^b \frac{dx}{v(x)}}_{\frac{T}{2}} = \frac{\tilde{C}^2}{4m}T = \frac{\tilde{C}^2\pi}{2m\omega} = 1 \qquad \tilde{C} = \sqrt{\frac{2m\omega}{\pi}}$$

$$\boxed{\psi(x) = \sqrt{\frac{2m\omega}{\pi p(x)}}\cos\left[\frac{1}{\hbar}\int_a^x dx\, p(x) - \frac{\pi}{4}\right]}$$

ГЛАВА 9: СПИН

§ 1. Спин частицы

<u>спин</u> – собств. мом. импульса частицы

1 Экспер-т 1922 г. Штерн · Герлах: атомарный водород пропускается ч/з сильно неодноp. магн. поле

магн. момент ~ спину. На сколько пучков будет расщепл. первонач. пучок?

Число пучков = число проекций спина (2 пучка $= \underbrace{2S+1}_{\text{число проекций}} = 2 \Rightarrow \boxed{S = \frac{1}{2}}$ спин $\bar{e}$ в единицах $\hbar$

$\hat{l}$, $\hat{S}$

Спины могут принимать целые и полуцелые значения

Св-ва спина д.б. такими же как и св-ва орбит. момента

Спин - собств. мом. импульса частицы

Элементарные частицы, стандартная модель элемент. частицы

<u>4 фундам. взаимод</u>: гравитационные, эл-магн., сильные и слабые взаимод

сильные - сущест. ат. ядер, n, p

слабые взаимод. ответств. за β-распад ат. ядер

Частицы из кот. состоит материя, частицы - переносчики взаимодействий

<u>Лептоны</u> (от. греч. лептос - легкий): всего 6, $\boxed{\text{спин} = \frac{1}{2}}$ у всех лептонов!

3 семейства по 2 частицы: $\begin{pmatrix} \nu_e \\ e^- \end{pmatrix}$ - электронное нейтрино, электрон $\begin{pmatrix} \nu_\mu \\ \mu \end{pmatrix}$ мюонное нейтрино, - мюон

$1{,}78$ ГэВ $= m_\tau$

$\begin{pmatrix} \nu_\tau \\ \tau^- \end{pmatrix}$ таонное нейтрино, тау-лептон (таон)

$\bar{e}$ - стаб.
μ, τ^- - не стаб.

Эл-магн. взаимод. - переносчик <u>фотон</u> (обмен фотонами между заряж. част.)

Лептоны уч. в слабом взаимодействии. переносчики промежуточные бозоны

спин = 1 частицы обмена имеют <u>целый спин</u>.

$\gamma, W^+, W^-, Z^\circ$ - промежуточные бозоны (оч. больш. масса покоя)

фотон

$m_W = 80{,}7$ ГэВ
$m_Z = 95{,}2$ ГэВ
} оч. тяж. частицы

радиус взаимод. обратно ~ массе частиц обмена

у фотона масса 0. его рад. взаим. ∞

удалось объед. слабое взаимод. с эл. магн. - электрослабое взаимод.

в теории электрослабого взаимод. масса нейтрино = 0

у нейтрино спин $= \frac{1}{2}$

для частицы с нулев. массой можно ввести проекц. спина на момент импульса
спиральность – для частиц с нулевой массой

hadron

Сильное взаимодействие кварковая модель адрона. уч. в сильных взаим.

ядерные силы не явл. сильными

Адроны: барионы и мезоны

нуклоны есть составные частицы (состоят из кварков) кварков 6, 3 семейства

$$\begin{array}{ll} up & \begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix} \\ down & \end{array} \quad \begin{matrix} \frac{2e}{3} \text{ – заряд, верхний кварк} \\ -\frac{e}{3}\text{, нижн. кварк} \end{matrix} \qquad \begin{pmatrix} c \\ s \end{pmatrix} \begin{matrix} \frac{2e}{3} \text{ charm} \\ -\frac{e}{3} \text{ strange} \end{matrix} \qquad \begin{pmatrix} t \\ b \end{pmatrix} \begin{matrix} \frac{2e}{3} \text{ top} \\ -\frac{e}{3} \text{ bottom} \end{matrix}$$

спины $\frac{1}{2}$

кварки имеют заряды

$p = (uud) \quad n = (udd)$ в свободном состоянии кварк не может быть

Гелман взял слово „кварк"

барионы – частицы, состоящие из 3 кварков - тяж. частицы

мезоны сост. из 2-х кварков: из кварка и антикварка

π^+, π^-, π^0 $\quad \underbrace{\pi^+ = (\bar{d}u) \quad \pi^- = (d\bar{u}) \quad \pi^0 = (u\bar{u} + d\bar{d})}_{\text{Спин} = 0}$

античаст.

δ-частицы
дельта $\underbrace{\Delta^{++}, \Delta^{+}, \Delta^{0}, \Delta^{-}}_{S = \frac{3}{2} \text{ спин}}$ масса Δ-част. $m_\Delta = 1{,}232$ ГэВ

синий, зелен., красный

$\Delta^{++} = (uuu) \quad \Delta^{+} = (uud) \quad \Delta^{0} = (udd) \quad \Delta^{-} = (ddd)$

пр-п Паули запрещ. 3 част. нах. в одном состоянии

кварки должны хар-ся еще одним квант. числом: $\underbrace{\text{цвет (синий, зеленый, красный)}}_{\text{белый цвет}}$

Мы наблюд. только белые объекты. Кварк не может нах. в своб. сост. (он цветной, if кварки располож. на малом расст. то они движ. как свободные частицы ⇒ асимптотическая свобода (при $r \to 0$)

$R_N \approx 0{,}8 \cdot 10^{-13}$ см (размер нуклона) ⇒ сила взаимод. $\to \infty$ <u>запирание кварков</u>

Взаимод. между кварками – сильное взаимод.

кварк-кварковые силы – элемент. сильное взаимод.

<u>глюоны</u> склеивают кварки внутри адрона

$\downarrow$

их 8

Эксперимент: есть ли в природе кварки?

$\bar{e}$ пучок $\bar{e}$ (высокоэнергет.)

p водородная мишень

$\boxed{\text{рассеяние } \bar{e} \text{ на p.}}$ p - не точечная частица (Как внутри распределен заряд?)

p сост. из <u>3-х точечных кварков</u>

$\exists$ кварки! доказано

if у частицы спин $\neq 0$ мы можем ввести понятие <u>полного мом. имп. част.</u>

$$\underbrace{\hat{\vec{j}}}_{\text{полный мом. имп. част.}} = \underbrace{\hat{\vec{l}}}_{\text{орбит. момент}} + \underbrace{\hat{\vec{S}}}_{\text{спиновый момент}} \qquad |l-s| \le j \le l+s$$

§2. Оператор спина

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\,\varepsilon_{ijk}\hat{S}_k \qquad [\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hat{S}_z$$

$S = \frac{1}{2}$ $\quad S_z = \pm\frac{1}{2}$ (проекц. на ось квантования) две проекции

$\forall$ опр. можно сопоставить матрицу. двухрядная матрица

Паули ввел спин: $\hat{S} = \frac{1}{2}\hat{\vec{\sigma}}$ оператор $\hat{\sigma}$

для спина $\frac{1}{2}$

$[\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j] = 2i\,\varepsilon_{ijk}\,\sigma_k$ собств. знач. $\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = 1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

рассмотрим такую комбинацию:

$$2i\left(\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x\right) = \left(2i\,\hat{\sigma}_x\right)\hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y\left(2i\,\hat{\sigma}_x\right) = \left(\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y\right)\hat{\sigma}_y +$$

$$+\,\hat{\sigma}_y\left(\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y\right) = \cancel{\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y} - \cancel{\hat{\sigma}_z}\underset{1}{\underset{\parallel}{\hat{\sigma}_y^2}} + \underset{1}{\underset{\parallel}{\hat{\sigma}_y^2}}\cancel{\hat{\sigma}_z} - \cancel{\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y} = 0$$

$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x = 0 \longrightarrow$ антикоммутатор

$$\boxed{\{\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y\} = \hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x}$$

$$\{\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j\} = 2\delta_{ij}$$

$$+\begin{cases} \hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j - \hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_i = 2i\,\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k \\ \hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j + \hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_i = 2\delta_{ij} \end{cases} \quad : \frac{1}{2}$$

$$\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j = \underbrace{\delta_{ij}}_{\text{константа}} + \underbrace{i\,\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k}_{\text{член, линейный по } \hat{\sigma}}$$

$$\boxed{\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \text{ - матрицы Паули}}$$

построим двухрядные опр. $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ в предст. в кот. $\hat{\sigma}_z$ - диагональна

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \qquad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}$$

$$\left(\hat{l}_x\right)_{m,m-1} = \left(\hat{l}_x\right)_{m-1,m} = \frac{1}{2}\sqrt{(l+m)(l-m+1)}$$

$$\left(\hat{l}_y\right)_{m,m-1} = -\left(\hat{l}_y\right)_{m-1,m} = -\frac{i}{2}\sqrt{(l+m)(l-m+1)}$$

σ - проекция спина на ось квантов-я

$a_{11} = a_{22} = b_{11} = b_{22} = 0$

$$\underset{a_{12}}{\left(\hat{\sigma}_x\right)_{\sigma,\sigma-1}} = \underset{a_{21}}{\left(\hat{\sigma}_x\right)_{\sigma-1,\sigma}} = \sqrt{(s+\sigma)(s-\sigma+1)} = 1$$

$$\underset{b_{12}}{\left(\hat{\sigma}_y\right)_{\sigma,\sigma-1}} = -\underset{b_{21}}{\left(\hat{\sigma}_y\right)_{\sigma-1,\sigma}} = -i$$

$$\boxed{\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}}$$

3 матр. Паули + един. матр. предст. собой полный набор двухрядных матриц

$$\hat{A} = \alpha_1 + \alpha_2 \hat{\sigma}_x + \alpha_3 \hat{\sigma}_y + \alpha_4 \hat{\sigma}_z$$

$$\vec{\hat{\sigma}} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z) \qquad \vec{\hat{\sigma}}^2 = 3 \qquad Sp\, \hat{\sigma}_i = 0 \qquad \langle \vec{\hat{S}}^2 \rangle = \frac{1}{4} \langle \hat{\vec{\sigma}}^2 \rangle = \frac{3}{4}$$

шпур $\forall$ матр. Паули $= 0$

$$\hat{T}_\alpha = e^{i\alpha \hat{S}_z} \qquad x'(\sigma) = T_\alpha x(\sigma) = e^{i\alpha \hat{S}_z} \cdot x(\sigma) = e^{i\alpha\sigma} x(\sigma)$$

$\alpha = 2\pi$ поворот на 2π $\quad (-1)$

инвариантность: поворот на 4π

03.05.12

§3. Спиновые функции

Спин - квантовая хар-ка частицы

в класс. мех. спин исчезает $\hbar S \to \underline{0}$

переход к класс. мех. $\hbar \to 0$, $S(\text{спин}) = const$

Ввести понятие спиновой переменной σ

$\hbar l \to \underline{Const}$

l - не явл. const орбит. мом.

$\hbar \to 0$, $l \to \infty$

в класс. пределе орбит. мом. остается! а спин исчезает

def: проекция спина на ось квантования

σ - спиновая перем.

$S = \frac{1}{2} \qquad \sigma = \pm \frac{1}{2}$

$S = 1 \qquad \sigma = \pm 1, 0$

$(2S+1)$ - число проекций

Состояние част., с отличным от нуля спином хар-я 4 велич: $\underbrace{x, y, z}_{\text{коорд.}}, \underbrace{\sigma}_{\text{спиновая переменная}}$

пространств-е пер-е приним. непр. знач. x, y, z

спин. перем. σ приним. дискр. знач. $-S \le \sigma \le S$ $\quad (2S+1)$

$$\Psi(x, y, z, \sigma) \longrightarrow 2S+1 \text{ ф-я простр-х переменных}$$

вероятность велич. σ есть: $W(\sigma) = \int d^3r \left|\Psi(x,y,z,\sigma)\right|^2$
того что част. имеет опред. знач. спина
на ось квантов.

вероятн. того, что част. нах. в эл. объема d^3r: $dw(\vec{r}) = w(\vec{r})\, d^3r = \sum\limits_{\sigma=-s}^{s} \left|\Psi(x,y,z,\sigma)\right|^2 \cdot d^3r$

σ прин. $2s+1$, то операторы действ-щие на σ предст. собой $2s+1$-ранговые матрицы

if $\underline{\underline{s=0}}$ $\quad \hat{\vec{S}}\Psi = 0$ (нет спиновой переменной)

$\sigma = 0$ $\quad$ <u>в.ф.</u> одна - <u>скаляр</u>

упрощение

if $s = \frac{1}{2}$, то в.ф. част. имеет 2 компонента $\Psi = \begin{pmatrix} \Psi(\frac{1}{2}) & 0 \\ \Psi(-\frac{1}{2}) & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Psi(\frac{1}{2}) \\ \Psi(-\frac{1}{2}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Psi^1 \\ \Psi^2 \end{pmatrix}$

запишем в таком виде двухкомпонентная в.ф.

$\left[\begin{array}{l} \text{двухкомпонентный спинор или} \\ \underline{\text{спинор первого ранга}} \end{array} \longrightarrow \begin{pmatrix} \Psi^1 \\ \Psi^2 \end{pmatrix}\right]$

Как записать сопр. в.ф.?

$$\Psi^+ = \begin{pmatrix} \Psi^*(\frac{1}{2}) & \Psi^*(-\frac{1}{2}) \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \left(\Psi^*(\tfrac{1}{2}) \;\; \Psi^*(-\tfrac{1}{2})\right) = \left(\Psi^{1*}, \Psi^{2*}\right)$$

Как спиноры преобраз. при повор. коорд?

$\underbrace{\Psi^{1'}}_{\text{в повернутой СК}} = a\Psi^1 + b\Psi^2$, (линейное преобраз.) $\quad \Psi^{2'} = c\Psi^1 + d\Psi^2$

a, b, c, d - некоторые комплексные числа

$\Psi^{\lambda'} = (\hat{U}\Psi)^\lambda$, $\quad \hat{U} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$

λ - спинорный индекс

для $s = \frac{1}{2}$ $\quad \lambda = 1$ или 2

Пусть у нас есть 2 спинора:

$\varphi = \begin{pmatrix} \varphi^1 \\ \varphi^2 \end{pmatrix}$, $\chi = \begin{pmatrix} \chi^1 \\ \chi^2 \end{pmatrix}$

$\varphi^1\chi^2 - \varphi^2\chi^1$

антисимметр. величина

антисим. спинор

$$y'^1 x'^2 - y'^2 x'^1 = (ay^1 + by^2)(cx^1 + dx^2) - (cy^1 + dy^2)(ax^1 + bx^2) =$$

смотрим, как это преобраз. при пов. СК

$$= \cancel{ac}\, y^1x^1 + ad\, y^1x^2 + bc\, y^2x^1 + \cancel{bd}\, y^2x^2 - \cancel{ac}\, y^1x^1 - bc\, y^1x^2 - ad\, y^2x^1 - \cancel{bd}\, y^2x^2 =$$

$$= (ad - bc)(y^1x^2 - y^2x^1)$$

нет сжатия, растяж $\Rightarrow$ $\boxed{ad - bc = 1}$ $\det \mathcal{U} = 1$

величина есть скаляр, соотв. спину $S = 0$

$\boxed{y^1x^2 - y^2x^1} \rightarrow$ есть скаляр спину $S=0$ соотв. антисимметр. спинор

$$\underbrace{|\psi^1|^2 + |\psi^2|^2}_{\text{скаляр}} = \sum_{\sigma} |\Psi(\sigma)|^2 = \Psi^1\Psi^{1*} + \Psi^2\Psi^{2*}$$ вер. того, что част. нах. в эл. объема d^3r

преобразование $\hat{\mathcal{U}}$ есть унитарное преобраз. (не меняет сумму квадр. величин при повороте)

$$\hat{\mathcal{U}}^+ \hat{\mathcal{U}} = 1 \qquad \hat{\mathcal{U}} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

условие унитарности опер. $\hat{\mathcal{U}}$ в матр. форме: $\begin{pmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} =$

$$= \begin{pmatrix} |a|^2 + |c|^2 & a^*b + c^*d \\ ab^* + cd^* & |b|^2 + |d|^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$\underbrace{d = a^*,\ c = -b^*}$ условия, чтобы выполн.

$$\begin{aligned} a &= a_1 + i a_2 \\ b &= b_1 + i b_2 \\ c &= c_1 + i c_2 \\ d &= d_1 + i d_2 \end{aligned} \qquad \begin{cases} a_1 = d_1 & a_2 = -d_2 \\ b_1 = -c_1 & b_2 = c_2 \end{cases}$$

4 условия

$ad - bc = 1$

5 условие

всего 8 const $\rightarrow$ произвольными ост. 3 const (3 угла Эйлера опред. пов-т СК)

Построим спиновые ф-ции $\chi(S_i)$ $i = x, y, z$ для спин. числа $\frac{1}{2}$, описывающие сост. част. с опред. зн. числа спина на одну из осей

$\chi(S_i)$ - спиновая ф-я, где $i = x, y, z$

Проекц. на ось x: $\chi(S_x) = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ спинор $\hat{S}_x = \frac{1}{2}\hat{\sigma}_x$

$\Psi(\vec{r}, \sigma) = \psi(\vec{r})\underbrace{\chi(\sigma)}_{\text{спиновая часть в.ф.}}$ $\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ матр. Паули

Задача на СЗ и СФ, решаем: $\hat{S}_x \chi(S_x) = S_x \chi(S_x)$

$$\underbrace{\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}}_{\hat{S}_x}\underbrace{\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}}_{\chi(S_x)} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} = S_x \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{array}{l} b = 2S_x a = \underbrace{2S_x 2S_x}\, b \\ a = 2 S_x b \end{array}$$

$$4S_x^2 = 1$$

Надо опред. a и b, хотим постр. нормированную в.ф.: $\boxed{S_x = \pm\frac{1}{2}}$

$|\chi(S_x)|^2 = |a|^2 + |b|^2 = 1$ норм. усл.е

$$\chi\left(S_x = +\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\chi\left(S_x = -\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$\chi(S_y) = \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}$ $\hat{S}_y = \frac{1}{2}\hat{\sigma}_y$ $\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \hat{\sigma}_y$ матр. Паули

$$\hat{S}_y \chi(S_y) = S_y \chi(S_y)$$

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} = \frac{i}{2}\begin{pmatrix} -d \\ c \end{pmatrix} = S_y \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} \qquad \left.\begin{array}{l} -id = 2S_y c \\ ic = 2S_y d \end{array}\right\} \; d = 2S_y ic$$

$$4S_y^2 = 1$$

$$\boxed{S_y = \pm\frac{1}{2}}$$

$$\chi\left(S_y = +\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$$

$$\chi\left(S_y = -\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

$\chi(S_z) = \begin{pmatrix} e \\ f \end{pmatrix}$ $\quad \hat{S}_z = \frac{1}{2}\hat{\sigma}_z, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \hat{S}_z \chi(S_z) = S_z \chi(S_z)$

$\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} e \\ f \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} e \\ -f \end{pmatrix} = S_z \begin{pmatrix} e \\ f \end{pmatrix} \qquad 2S_z = \pm 1 \qquad \boxed{S_z = \pm \frac{1}{2}}$

$\rightarrow \chi(S_z = +\frac{1}{2}) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \chi(S_z = -\frac{1}{2}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

if $s > \frac{1}{2}$ $\forall$ спин можно построить из спинов $\frac{1}{2}$

S $\quad n = 2S$ со $S = \frac{1}{2}$ и мы получим спин S

n частиц и напр. по оси квантования

$\underbrace{\psi^1 \chi^1 \ldots}_{2S}$ спинор более высокого ранга, но симметр. по спинорным индексам

После поворота СК спинор должен остаться симметр. по спин. индексам

Спинор $\forall$ ранга симметр. по спинорн. индексам. Единств. антисимметр. $S = 0$

$$\begin{cases} \Psi(\sigma) = \psi^{\overbrace{11\ldots1}^{S+\sigma}\overbrace{22\ldots2}^{S-\sigma}} & \text{проекц. спина} = \sigma \\ \Psi^{\lambda\mu\ldots} = \psi^\lambda \chi^\mu \ldots & \end{cases}$$

Нужно найти соотв. между записями в.ф.

$$\sum_{\sigma=-S}^{S} |\Psi(\sigma)|^2 = \sum_{\lambda,\mu\ldots=1}^{2} |\Psi^{\lambda\mu\ldots}|^2$$ – скаляр, т.к. это сумма опред. вер-ть

$$C_{2S}^{S=\sigma} = \frac{(2S)!}{(S+\sigma)!\,(S-\sigma)!} \qquad \Psi(\sigma) = \sqrt{\frac{(2S)!}{(S+\sigma)!\,(S-\sigma)!}}\;\Psi^{\overbrace{11\cdot1}^{S+\sigma}\overbrace{22\ldots2}^{S-\sigma}}$$

число сочетаний

08.05.12.

24.05 } 15^{00} - 403 ауд.
29.05
30.05

4 июня 10^{00} 403 ауд. пересдача

2 вопроса, 1 задача

Глава

§1. Принцип неразличимости частиц

тождеств. частицы - одинаковые по своим св-м частицы

$1 \ldots 2 \ldots 3 \ldots 4 \ldots$ пронумеровать → следить за движ. част. класс. мех

кв. мех - нет траектории у частиц

Следить за кажд. част. в кв. мех. мы не можем (пр-п неопредел.)

Частицы теряют свою индивидуальность. Полная неразличимость.

Математически: гамильтониан сист. тожд. частиц 3 простр. коорд.

Кажд. частицу хар-м 4 величинами $\xi_k = (\overbrace{x_k, y_k, z_k}, \sigma_k)$

набор 4-х перем-х ; спиновая перем-ая

$\hat{H}(\xi_1, \xi_2, \ldots \xi_i \ldots \xi_j \ldots \xi_n, t) =$ гамильтониан не должен мен. if мы поменяем 2 част. местами (част. не различимы)

$= \hat{H}(\xi_1, \xi_2, \ldots \xi_j \ldots \xi_i \ldots \xi_n, t)$ гамильт. inv относ. перестан. $\forall$ пары тождеств. частиц

$\Psi(\xi_1, \xi_2, \ldots \xi_i, \ldots \xi_j, \ldots \xi_n, t) = C \cdot \Psi(\xi_1, \xi_2 \ldots \xi_j, \ldots \xi_i, \ldots \xi_n, t) =$

в.ф. определена с точн. до множит.

$= C^2 \Psi(\xi_1, \xi_2, \ldots \xi_i, \ldots \xi_j \ldots \xi_n, t) \Rightarrow \boxed{C^2 = 1} \qquad C = \pm 1$

$\begin{cases} C = +1 & \text{в.ф. явл. симметричной} \\ C = -1 & \text{в.ф } \Psi \text{ - антисимметрична} \end{cases}$

Утв.: if в какой-то мом. вр. сист. тожд. частиц описыв. симметр. (антисим.) в-ф., то она будет описыв. симметр. (антисим.) в.ф во все последующие мом. вр.

Док-во:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\hat{H}\Psi \text{ (ур. Шредингера с временной зав-ю) } \Big| \cdot dt$$

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}dt=\hat{H}\Psi\cdot dt \qquad \boxed{\frac{\partial\Psi}{\partial t}\cdot dt=d_t\Psi}$$

приращение в.ф. за вр. dt

$$d_t\Psi=-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Psi dt$$

if в.ф. симметр. то правая часть inv относ. перест. $\forall$ пары тожд.-х частиц

Для сим. в.ф. симметрия сохр. во вр.

Чем обусловлен выбор симметрии в.ф. Это св.-во общее и может определяться только природой частиц. Анализ экспер. данных: св-во симметрии в.ф. однозначно связано с велич. спина частиц.

✓ if част. тожд. имеют целый спин (или 0) – то такие част. подчин. статистике Бозе-Эйнштейна и описыв. симметр. в.ф. (бозоны): π^+, π^-, π^0

✓ част., имеющие полуцелый спин подчин. стат. Ферми-Дирака → (фермионы) – описыв. антисиммет. в.ф.

бозоны: 0 спин пионы π^+, π^-, π^0, α, ^{12}C, векторные мезоны →

$$\rightarrow \underbrace{\rho^+, \rho^-, \rho^0}_{\text{спин}=1}, \underbrace{\gamma}_{\substack{\text{фотоны}\\ \text{спин}=1}}$$

фермионы: e^-, μ^-, ν_e, $q \rightarrow u, d, s, c, \ldots$, ^9Be, p, n

спин $\frac{1}{2}$ кварки спин $\frac{1}{2}$ сост. из 9 фермионов спин $\frac{1}{2}$

Как построить в.ф. симметр. и антисимметр. для сист. тожд. частиц?

$\vartheta_1, \vartheta_2, \ldots$ номера состояний, в которых могут наход. тожд. част.
(среди них могут быть одинаковые)

в.ф. сист. тожд. бозонов должна содерж. произвед. типа:

$\Psi_{\vartheta_1}(\xi_1)\cdot\Psi_{\vartheta_2}(\xi_2)\cdot\ldots$ система не взаимод-х частиц

Система двух тожд. частиц: есть 2 тожд. бозона

$$\Psi(\xi_1,\xi_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\Psi_{\vartheta_1}(\xi_1)\Psi_{\vartheta_2}(\xi_2)+\Psi_{\vartheta_2}(\xi_1)\cdot\Psi_{\vartheta_1}(\xi_2)\right]$$

n тожд. бозонов. Строим в.ф.:

$$\Psi(\xi_1,\xi_2,\ldots\xi_n)=\sqrt{\frac{n_1!\,n_2!\ldots}{n!}}\sum\Psi_{\vartheta_1}(\xi_1)\Psi_{\vartheta_2}(\xi_2)\ldots\Psi_{\vartheta_n}(\xi_n)$$

сумма берется по всем перестановкам индексов $\vartheta_1,\vartheta_2,\ldots\vartheta_n$

числа n_i указывают сколько индексов $\vartheta_1,\vartheta_2,\ldots$ одинаковы

$\sum n_i = n$

вывод: в $\forall$ состоянии может находится как угодно много тожд-х бозонов. Понятие бозе-конденсации

все бозоны при пониж. температуры могут собраться на самом низком ур-не!

---

2 тожд. фермиона: $\Psi(\xi_1,\xi_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\Psi_{\vartheta_1}(\xi_1)\Psi_{\vartheta_2}(\xi_2)-\Psi_{\vartheta_2}(\xi_1)\cdot\Psi_{\vartheta_1}(\xi_2)\right]=$

в.ф. изменит знак при перестан. 2-х наборов ξ_1,ξ_2.

Соглашение:

? как первоначально выбрать знак

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix}\Psi_{\vartheta_1}(\xi_1) & \Psi_{\vartheta_1}(\xi_2)\\ \Psi_{\vartheta_2}(\xi_1) & \Psi_{\vartheta_2}(\xi_2)\end{vmatrix}$$

$$\Psi(\xi_1,\xi_2,\ldots\xi_n)=\frac{1}{\sqrt{n!}}\begin{vmatrix}\Psi_{\vartheta_1}(\xi_1) & \Psi_{\vartheta_1}(\xi_2) & \ldots & \Psi_{\vartheta_1}(\xi_n)\\ \Psi_{\vartheta_2}(\xi_1) & \Psi_{\vartheta_2}(\xi_2) & \ldots & \Psi_{\vartheta_2}(\xi_n)\\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot\end{vmatrix}$$

детерминант Слэтера

два тожд. фермиона не могут находиться в одинак. состоянии.

пр-п запрета Паули $\Rightarrow$ детерм. Слэтера обрат. в ноль

Сист. дискр. уровней

тожд. фермионы не могут собраться на 1 уровне

<u>Атомное ядро:</u> n и p при оч. низк. темпер.

фактически, они не взаимод. между собой (из-за пр-па запрета Паули)

§2. Обменное взаимодействие

в ур. Шредингера оператор спина не входит.

$\Psi(\xi_1,\xi_2,\dots)=\psi(\vec r_1,\vec r_2\dots)\chi(\sigma_1,\sigma_2,\dots)$ в.ф. факторизуется, можно запис. в виде произвед. координатной и спиновой части

в.ф. должна обладать определенной симметрией.

Сист. из двух тожд. частиц. if они облад. 0 спином (бозоны) $\to$ в.ф. д.б. симметр. спиновая часть отсутствует.

2 част. со спином $\frac{1}{2}$: $\lambda=\begin{pmatrix}\lambda^1\\ \lambda^2\end{pmatrix}$, $\mu=\begin{pmatrix}\mu^1\\ \mu^2\end{pmatrix}$ есть 2 спинора

Построим спинор 2-го ранга:

симметр. спиноры

$\lambda^1\mu^1=|1\ 1\rangle$ (спин 1, проекция 1) $\quad \lambda^2\mu^2=|1,-1\rangle \quad \frac{1}{\sqrt2}(\lambda^1\mu^2+\lambda^2\mu^1)=|1,0\rangle$

$\frac12\ -\frac12\ -\frac12\ \frac12$

антисим. спиноры $\qquad$ if спин суммарн. $=0$ спинор антисим.

$\frac{1}{\sqrt2}(\lambda^1\mu^2-\lambda^2\mu^1)=|0\ 0\rangle$

зависимость от полного спина - обменное взаимодействие

10.05.12.

§3. Вторичное квантование. Случай статистики Бозе

втор. квант-е – спец. метод описания физ. сист., в кот. используются в-ры состояний, опер-ры рождения и уничтожения.

импульс сохр. у сист. тождеств. не взаимод-х частиц
if част. взаимод. → имп. отд-х частиц не сохр.

$\Psi(\xi_1, \xi_2, \ldots)$ $\quad\quad$ $\Psi(n_1, n_2, \ldots)$ $\quad$ $n_1, n_2, \ldots$ → числа заполнения (показ. сколько частиц нах. в 1 сост., во 2 и так далее

взаимод. част. → числа заполнения сохр. не будут

$|n_1 n_2 \ldots\rangle$ – вектор-состояния

в таком формализме опер-ры действ. на числа заполнения

Важно понять, что постулир-ся (явл. аксиомами), а что получ. автоматич.

$\hat{a}_i$, $\hat{a}_i^+$ → опер. уничтож. част. в сост. i

↓

опер-р уничтожения частицы в сост. i

действие одного из этих опер. в постулируем по аналог. с гармон. осцил.

$$\boxed{\hat{a}_i |n_1 n_2 \ldots n_i \ldots\rangle = \sqrt{n_i}\, |n_1 n_2 \ldots n_{i-1} \ldots\rangle}$$

уничтож. 1 част. в сост. i → (i-1)

постулат ↑.

явный вид опер. a_i $\quad$ $\hat{a}_i = |n_1 n_2 \ldots n_{i-1} \ldots\rangle \sqrt{n_i} \langle n_1 n_2 \ldots n_i \ldots|$

$\hat{a}_i^+ = \langle n_1 n_2 \dots n_i+1 \dots \rangle \sqrt{n_i+1} \langle n_1 n_2 \dots n_i \dots |$ { Эрмит. сопр.: бра-вектор перешел в кэт-вектор, кэт. в-р → в бра-в-р }

$n_i \to n_i + 1$

$\hat{a}_i^+ | n_1 n_2 \dots n_i \dots \rangle = \sqrt{n_i+1} | n_1 n_2 \dots n_i+1 \dots \rangle$ число частиц увелич. на 1

Опер-р $\hat{a}_i$, $\hat{a}_i^+$ действ. только на i-ое состояние

опер. $\hat{a}_i$, $\hat{a}_i^+$ явл. не диаг. в предст. чисел заполнения

$\langle n_i - 1 | \hat{a}_i | n_i \rangle = \sqrt{n_i}$ $\quad \langle n_i + 1 | \hat{a}_i^+ | n_i \rangle = \sqrt{n_i+1}$ / отличные от 0 матр. элементы /

$$\begin{cases} \langle n_i | \hat{a}_i \hat{a}_i^+ | n_i \rangle = n_i + 1 \\ \langle n_i | \hat{a}_i^+ \hat{a}_i | n_i \rangle = n_i \end{cases}$$

$\hat{a}_i^+ \hat{a}_i | n_i \rangle = n_i | n_i \rangle$

$\underline{\hat{a}_i^+ \hat{a}_i = \hat{n}_i}$ → оператор числа частиц в i-ом состоянии

из верхн. − нижн.

$\langle n_i | \hat{a}_i \hat{a}_i^+ - \hat{a}_i^+ \hat{a}_i | n_i \rangle = 1 \quad \Rightarrow \quad \hat{a}_i \hat{a}_i^+ - \hat{a}_i^+ \hat{a}_i = [\hat{a}_i, \hat{a}_i^+] = 1$

$[\hat{a}_i, \hat{a}_k] = 0 \qquad [\hat{a}_i^+, \hat{a}_k^+] = 0 \qquad [\hat{a}_i, \hat{a}_k^+] = \delta_{ik}$

вакуумное состояние: все числа заполнения = 0

$\hat{a}_i | 0 \rangle = 0 \qquad \hat{a}_i^+ | 0 \rangle = | 1_i \rangle$ одна частица в сост. i

$\hat{a}_i \hat{a}_i^+ | 0 \rangle = | 0 \rangle$ вакуум $\qquad \hat{a}_i \hat{a}_k^+ | 0 \rangle = \delta_{ik} | 0 \rangle$

$| n_i \rangle = \frac{1}{\sqrt{n_i!}} (\hat{a}_i^+)^{n_i} | 0 \rangle \qquad | n_1 n_2 \dots \rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} (\hat{a}_1^+)^{n_1} (\hat{a}_2^+)^{n_2} \dots | 0 \rangle$

{ для удобства: $| i \rangle = | 1_i \rangle$ одна частица в сост. i }

получим выраж. для одночастичного оператора в представл. вторичного квантования:

$\hat{f}^{(1)}$ - одночастичный опер-р $\quad \underbrace{\hat{f}^{(1)}|\chi\rangle}_{\text{одна част. в состоянии } \chi} = \sum_i |i\rangle\langle i|\hat{f}^{(1)}|\chi\rangle =$

$= \sum_i f^{(1)}_{i\chi}|i\rangle = \quad \left| f^{(1)}_{i\chi} = \langle i|\hat{f}^{(1)}|\chi\rangle \right|$ матр. элемент

$\left\{ |i\rangle = \hat{a}_i^+|0\rangle \right\}$ $\qquad \hat{a}_i\hat{a}_k^+|0\rangle = \delta_{ik}|0\rangle$

$= \sum_i f^{(1)}_{i\chi}\hat{a}_i^+|0\rangle = \sum_{i,k} f^{(1)}_{ik}\hat{a}_i^+\delta_{k\chi}|0\rangle = \sum_{i,k} f^{(1)}_{ik}\hat{a}_i^+\hat{a}_k\hat{a}_\chi^+|0\rangle =$

$= \sum_{i,k} f^{(1)}_{ik}\hat{a}_i^+\hat{a}_k|\chi\rangle$ $\qquad \boxed{\hat{f}^{(1)} = \sum_{i,k} f^{(1)}_{ik}\hat{a}_i^+\hat{a}_k} \rightarrow$ выражение для одночастичного опер-ра в предст. втор. квантов-я

двухчастичный опер-р:

$\hat{f}^{(2)}$ - действует на переменные двух частиц $\quad \hat{f}^{(2)} = \frac{1}{2}\sum f^{(2)}_{ik,lm}\hat{a}_i^+\hat{a}_k^+\hat{a}_l\hat{a}_m$

$f^{(2)}_{ik,lm} = \langle ik|\hat{f}^{(2)}|lm\rangle$

Построение гамильтониана в методе втор. квантования

$\hat{H} = \sum_\alpha \hat{H}_\alpha + \underbrace{\sum_{\alpha>\beta}\hat{U}^{(2)}(\vec{r}_\alpha, \vec{r}_\beta)}_{\text{оператор взаимод-я 2-х частиц}}$ $\qquad \Big\| \; \hat{H}_\alpha = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_\alpha + \hat{U}^{(1)}(\vec{r}_\alpha) \rightarrow$

$\hat{H}_\alpha \rightarrow$ одночастичный гамильтониан

$\hat{H} = \underbrace{\sum_{i,k,\alpha} H_{ik,\alpha}\hat{a}_i^+\hat{a}_k}_{\text{матр. элемент от одночаст-го опер-ра}} + \frac{1}{2}\sum_{\substack{ik,lm \\ \alpha>\beta}} \langle ik|\hat{U}^{(2)}(\vec{r}_\alpha, \vec{r}_\beta)|lm\rangle \hat{a}_i^+\hat{a}_k^+\hat{a}_l\hat{a}_m$

§4. Вторичное квантование. Статистика Ферми

в кажд. сост. может нах. не более 1 частицы

пр-п Паули

$\lambda_1 < \lambda_2 < \ldots < \lambda_i < \ldots$

перенумеруем все состояния, в кот. могут попадать частицы

Постулируем действ-е опер-ра уничтож. на в-р состояния:

$$\hat{a}_i |n_1 n_2 \ldots n_i \ldots\rangle = (-1)^{\sum_{\alpha=1}^{i-1} n_\alpha} \delta_{n_i 1} |n_1 n_2 \ldots n_i - 1 \ldots\rangle$$

n_i м.б. $= 0$ либо 1

$$(-1)^{\sum_{\alpha=1}^{i-1} n_\alpha}$$

Соглашение: (знак) if n_i стоит на 1 месте, то „+"

if не на 1-м месте (меняем местами 2 част. - мен. знак. опред. Слэтера) $\Rightarrow (-1)^{\sum_{\alpha=1}^{i-1} n_\alpha}$

Явный вид опер-ра уничтожения: $\hat{a}_i = |n_1 n_2 \ldots n_i - 1 \ldots\rangle (-1)^{\sum_{\alpha=1}^{i-1} n_\alpha} \delta_{n_i 1} \langle n_1 n_2 \ldots n_i \ldots|$

$$\hat{a}_i^+ = |n_1 n_2 \ldots n_i + 1 \ldots\rangle (-1)^{\sum_{\alpha=1}^{i-1}} \delta_{n_i 0} \langle n_1 n_2 \ldots n_i \ldots|$$

$n_i \to n_i + 1$

$$\hat{a}_i^+ |n_1 n_2 \ldots n_i \ldots\rangle = (-1)^{\sum_{\alpha=1}^{i-1} n_\alpha} \delta_{n_i 0} |n_1 n_2 \ldots n_i + 1 \ldots\rangle$$

$\langle n_i | \hat{a}_i \hat{a}_i^+ | n_i\rangle = \delta_{n_i 0} = 1 - n_i$; $\langle n_i | \hat{a}_i^+ \hat{a}_i | n_i \rangle = \delta_{n_i 1} = n_i$ (сложим) $\Rightarrow$

$\langle n_i | \hat{a}_i \hat{a}_i^+ + \hat{a}_i^+ \hat{a}_i | n_i \rangle = 1$ $\qquad$ $\hat{a}_i \hat{a}_i^+ + \hat{a}_i^+ \hat{a}_i = \{\hat{a}_i, \hat{a}_i^+\} = 1$

антикоммутатор для стат. Ферми

$$\{\hat{a}_i, \hat{a}_k^+\} = \delta_{ik}$$