05.09.12

Квантовая механика. Часть 2.

Peter Higgs 1960 год предсказал частицу Good Particle

Leon Max Lederman God Particle

LHC эксперимент большой адронный коллайдер

детектор CMS, ATLAS новая частица $(125{,}3 \pm 0{,}3)$ ГэВ

достоверность 10^{-6}

бозон Хиггса

лептоны: e, нейтрино — электрослабое взаимод-е

кварки — частицы обмена: γ э/м

$W^{\pm}$, Z^{0} слабое

трансурановые элементы: было 112

114 – флеровий

116 – ливерморий

использ. ускор. пучок $^{48}_{20}Ca$

конец октября – ректорская к/р

глава 1. ATOM

§ 1. Атомные уровни энергии.

структура атомов нерелятив. кв. мех. стац. сост-е описыв. ур-м Шр. для сист. $\bar{e}$, кот. движ. в поле ат. ядра

вероятность распред-я $\bar{e}$ внутри атома

многоэлектронные сист. (атомы, кроме ат. H) – задача многих тел (точно решить нельзя)

ур-я Фадеева 60 год операторные интегродиф. ур-я

Эл/маг. поле имеет ∞ радиус действия

Как можно хар-ть атом? Сфер. симметричен - центр-но- симметр. с поле: сохр. мом. импульса

полный момент имп. L спины складыв. по модели вект. сложения S

ур. эн. вырожден $(2L+1)(2S+1)$ - кратность вырождения уровня

в точной теории (релятив.) должен сохр. полный мом. $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$

но для ат. релятив. эфф. не велики $\rightarrow$ сохр. L и S.

мультиплет с разными знач. $\vec{J}$ (расщепл. уровень с L, S)

$|L - S| \leq J \leq L + S$ if $L > S$ то $2S+1$

if $L < S$ то $2L+1$

атомные уровни энергии — <u>спектральные термы</u>:

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

$\boxed{2S+1} \rightarrow$ мультиплетность

$L_J \rightarrow$ полный момент

$^2P_{3/2}$ $S = \frac{1}{2}$, $L = 1$

$J = \frac{3}{2}$

§2. Состояние $\bar{e}$ в атоме

пр-п Паули запрещ. двум фермионам нах. в одном состоянии

одночастичные уровни

$\bar{e}$ сталкиваются, но не взаимод-т

столкновения не приводят в др. состояния

квазисвободные частицы

$\bar{e}$ вместе с полем ядра созд. поле — самосогласованное поле - поле, созд. всеми частицами, вход. в ат.

для кажд. $\bar{e} \rightarrow$ свое самосогл. поле

явл. центр. симметр. полем

для индивид-го $\bar{e}$ – l L – для ат. как целого

Энергетич. ур. нумеруются гл. квант. числом n

l, n l: $\overset{0}{s}$ $\overset{1}{p}$ $\overset{2}{d}$ $\overset{3}{f}$ $\overset{4}{g}$ $\overset{5}{h}$ $n = 1, 2, 3, \ldots$

l - орбит. момент $n = l+1, l+2, \ldots$

$\underset{\substack{n=1 \\ l=0}}{1s}$, $2s$, $3s$ $\underset{\substack{n=2 \\ l=1}}{2p}$, $3p$

Чтобы полностью задать сост-е атома, кроме L, S, J необх. задать сост-е всех $\bar{e}$

Электронная конфигурация атома $\rightarrow$ $1s2p$ – $2\bar{e}$ в атоме

$^3P_0$

Кратность вырожд. $\bar{e}$ $\boxed{2(2l+1)}$

2 проекц. спина

$\bar{e}$, с одинаковыми l образуют атомную оболочку

замкнутая оболочка – полностью заполн. оболочка

$2p^3$ $(3\bar{e})$ $\rightarrow$ эквивалентные $\bar{e}$ (одинаковое n и l)

Эмпирическое пр-ло Хунда (Hund):

наименьшей эн. обладает терм с наиб. возм. при данной эл. конфигурации значением S и наиб. возм. при этом знач. L

p^4 : сист. из 4-х экв-х p-электронов. Определим термы:

	m	σ
I	1	1/2
II	0	1/2
III	−1	1/2
IV	1	−1/2
V	0	−1/2
VI	−1	−1/2

m - проекц. орбит. мом.

σ - проекц. спин. мом.

$^1D, {^3P}, {^1S}$

наим. эн.

$M_L = \sum m_i$

$M_S = \sum \sigma_i$

	M_L	M_S	$\|M_L M_S\rangle$
I + II + III + IV	1	1	$\|1\,1\rangle$
I + II + III + V	0	1	$\|0\,1\rangle$
I + II + $\overline{\text{IV}}$ + $\overline{\text{V}}$	2	0	$\|2\,0\rangle$
I + II + $\overline{\text{IV}}$ + $\overline{\text{VI}}$	1	0	$\|1\,0\rangle$
I + II + $\overline{\text{V}}$ + $\overline{\text{VI}}$	0	0	$\|0\,0\rangle$
I + $\overline{\text{III}}$ + $\overline{\text{IV}}$ + $\overline{\text{V}}$	1	0	$\|1\,0\rangle$
I + $\overline{\text{III}}$ + $\overline{\text{IV}}$ + $\overline{\text{VI}}$	0	0	$\|0\,0\rangle$
II + $\overline{\text{III}}$ + $\overline{\text{IV}}$ + $\overline{\text{V}}$	0	0	$\|0\,0\rangle$

$l=2 \quad s=0$

$$\left.\begin{matrix} |2\,0\rangle \\ |1\,0\rangle \\ |0\,0\rangle \end{matrix}\right\} \quad {}^1D$$

$${}^{2S+1}L_J$$

$l=1 \quad s=1$

$$\left.\begin{matrix} |1\,1\rangle \\ |0\,1\rangle \\ |1\,0\rangle \\ |0\,0\rangle \end{matrix}\right\} \quad {}^3P$$

$$|0\,0\rangle \quad {}^1S$$

§3. Водородоподобные уровни энергии

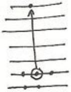
$$E_n = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2 n^2}$$

уровни вырожд. по l, потому что есть в-р Рунге-Ленца

He^+, Li^{++}

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

Δ_l - поправка Ридберга



один ē переведен в очень высоколежащее состояние

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \text{ - } \quad \text{1-й бор. рад.}$$

12.09.12

§4. Самосогласованное поле

Метод Хартри-Фока (вариационный)

построить волн. ф. атома многочастичной системы

$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n, \quad \int dq\,\psi_m^*\psi_n = \delta_{mn}$ в.ф. нормир. (спектр дискретный)

$\psi = \sum\limits_{n=1}^{\infty} a_n\psi_n$ разлож. по собств. ф. гамильтониана

$$\int dq\,\psi^*\psi = \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=1}^{\infty} a_n^* a_m \int dq\,\psi_m^*\psi_n = \sum_{n=1}^{\infty}|a_n|^2 = 1$$

$$\underbrace{\int dq\,\psi^*\hat{H}\psi}_{(*)} = \sum_{n=1}^{\infty} a_n^* \sum_{m=1}^{\infty} a_m \int dq\,\psi_n^*\hat{H}\psi_m = \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=1}^{\infty} a_n^* a_m E_m \int dq\,\psi_n^*\psi_m =$$

$= \sum\limits_{n=1}^{\infty}|a_n|^2 E_n \geqslant E_1$ задача отыскания эн. осн. сост. E_1

сводится к нахожд-ю min исходного функционала (*)

$E_n \geqslant E_1$

E_1

$$E_1 = \min \int dq\,\psi^*\hat{H}\psi \quad \text{при доп. усл.} \quad \int dq\,\psi^*\psi = 1$$

формулировка задачи

вариационная задача:

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

одночастичный гамильтониан H_k

$\hat{H} = \sum\limits_k \hat{H}_k + \frac{1}{2}\sum\limits_{k\neq e}\hat{V}_{ke}$ - гамильтониан атома

$\hat{H}_k$ - гамильт. одного $\bar{e}$, движ. в самосогл. поле

взаимод. $\bar{e}$ с ядром

$\hat{H}_k = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_k - \frac{Ze^2}{r_k}$ $\quad r_k$ - расст. до ядра атома

одночастичный гамильт.

двухчастичный гамильт. $\to V_{ke} = \frac{e^2}{r_{ke}}$, $\quad r_{ke} = |\vec{r}_k - \vec{r}_e|$ $\quad$ взаимод. между дв. $\bar{e}$

все зависит от пробной функции (заправочной ф-ции) - нулевое приближ.
Дальше будет исп. итерац. метод

Усл-е для в.ф. ⇒ 1) сконструировать в.ф. из одноэлектронных ф-й (в.ф. отд-х $\bar{e}$-ов)

2) эти одночастичные ф. Надо выбр. так чтобы энерг. была min.

(без этого →) 3) в.ф. д.б. антисимметрична (для $\bar{e}$ - фермионов)

$$\psi = \psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2)\dots\psi_Z(\vec{r}_Z), \qquad \int d^3r_i\,|\psi_i(\vec{r}_i)|^2 = 1$$ - кажд. одночаст. ф-я нормирована

считаем движение каждого $\bar{e}$ независимым

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

$\boxed{{}' \Rightarrow k\neq l}$

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

вариация $\delta\psi^*$ и $\delta\psi$ независимы

$$\delta\int dq\,\psi^*\psi = 0, \qquad \underbrace{\int dq\,\delta\psi^*\psi}_{=0} + \underbrace{\int dq\,\psi^*\delta\psi}_{=0} = 0$$

! тут ушла $\frac{1}{2}$, т.к. один раз надо варьир. по $\underline{k}$, один по $\underline{l}$

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

$$= \sum_k\delta\psi_k^*\int d^3r_k\Big\{\hat{H}_k + \sum_l{}'\int d^3r_l\,\psi_l^*\hat{V}_{kl}\psi_l\Big\}\psi_k = 0$$

$$\sum_k\delta\psi_k^*\int d^3r_k\Big\{\hat{H}_k + \sum_l{}'\int d^3r_l\,\psi_l^*\hat{V}_{kl}\psi_l - \varepsilon_k\Big\}\psi_k = 0$$

произвольный множитель Лагранжа $\underline{\varepsilon_k}$

$$\left(\hat{H}_k + \sum_l{}'\int d^3r_l\,\psi_l^*\hat{V}_{kl}\psi_l - \varepsilon_k\right)\psi_k = 0$$ сист. ур-й Хартри-Фока

Система связанных интегро-диф-х ур-й:

$$\Big(\hat{H}_K + \underbrace{\sum_l \int d^3r_l \, \psi_l^* \hat{V}_{Kl} \psi_l}_{V_K} - \varepsilon_K\Big)\psi_K = 0$$

выбор пробной функции → в/п функции $\hat{H}_K \psi_K^{(0)} = \varepsilon_K^{(0)} \psi_K^{(0)}$

ь потенциальной энергии V_K $\quad V_K^{(0)}(\vec{r}_K) = \sum_l \int d^3r_l \, \psi_l^{(0)*}(\vec{r}_l) \hat{V}_{Kl} \psi_l^{(0)}(\vec{r}_l)$

ср. энергия взаимод. к-го ē со всеми ост. ē атома

$$\big(\hat{H}_K + V_K^{(0)}(\vec{r}_K) - \varepsilon_K^{(1)}\big)\psi_K^{(1)}(\vec{r}_K) = 0, \quad V_K^{(1)}(\vec{r}_K) = \sum_l{}' \int d^3r_l \, \psi_l^{(1)*}(\vec{r}_l) \hat{V}_{Kl} \psi_l^{(1)}(\vec{r}_l)$$

$$\big(\hat{H}_K + V_K^{(1)}(\vec{r}_K) - \varepsilon_K^{(2)}\big)\psi_K^{(2)}(\vec{r}_K) = 0 \rightarrow \varepsilon_K^{(2)} \text{ и } \psi_K^{(2)}$$

Итерации ↑ $\quad$ заранее задаем точность (пока ε_K не будут отлич. не больше чем точность) Напр. 1%

7-8 итераций

При опред. числе итераций $\underline{V_K(\varepsilon_K)}$ не меняется в пределах зад. точности

$$\big(\hat{H}_K + \underbrace{V_K}_{\text{не меняется}} - \varepsilon_K\big)\psi_K = 0$$

V_K - самосогласованное поле Хартри (величн. не мен. при заданной наперед точности)

Для ∀ систем частиц прим. метод Хартри - Фока (для ядер).

<u>ε_K - энергия к-го ē</u> (индивид-го ē) одночастичная энергия

$$\varepsilon_K = \int d^3r \, \psi_K^* \hat{H}_K \psi_K + \sum_l{}' \int d^3r_K \, d^3r_l \, \psi_K^* \psi_l^* \hat{V}_{Kl} \psi_K \psi_l =$$

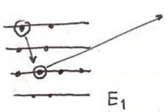
$$= \langle K|\hat{H}_K|K\rangle + \sum_l{}' \langle Kl|\hat{V}_{Kl}|Kl\rangle \quad \text{в дирак. пр.}$$

$$\hat{H} = \sum_K \hat{H}_K + \frac{1}{2}\sum_{K,l}{}' V_{Kl}, \quad E_1 = \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = \sum_K \langle K|\hat{H}_K|K\rangle + \frac{1}{2}\sum_l \langle Kl|\hat{V}_{Kl}|Kl\rangle$$

$$E_1 = \sum_K \varepsilon_K - \frac{1}{2}\sum_l{}' \langle Kl|\hat{V}_{Kl}|Kl\rangle$$

§5. Рентгеновские термы

терм - атомные ур. энергии



Излучение фотона, лежащего в рентген. спектре → рентгеновские уровни

$1s_{\frac{1}{2}}$ $\quad 2s_{\frac{1}{2}}$ $\quad 2p_{\frac{1}{2}}$ $\quad 2p_{\frac{3}{2}}$ - состояние ē в атоме

K $\quad L_{I}$ $\quad L_{II}$ $\quad L_{III}$

$n=1$
$l=0$

$3s_{\frac{1}{2}}$ $\quad 3p_{\frac{1}{2}}$ $\quad 3p_{\frac{3}{2}}$ $\quad 3d_{\frac{3}{2}}$ $\quad 3d_{\frac{5}{2}}$

M_{I} $\quad M_{II}$ $\quad M_{III}$ $\quad M_{IV}$ $\quad M_{V}$

(n, l) j - разные разница между ур. - релятив. эфф. (тонкая структура)
$n = l$

(L_{II}, L_{III}) → релятивистские дублеты (регулярные)
(M_{II}, M_{III})

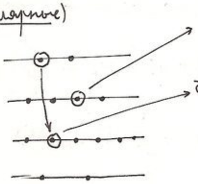
| n и l одинаковы
| j - разные

(n, j) l - разные отклонение поля от кулоновского
$n = j$ различная экранир-ка ядра

экранировочные дублеты (иррегулярные)

(L_{I}, L_{II})
(M_{I}, M_{II})

| $n=j$
| l-разные



безызлучательные переходы в ат.

2h1p - 2 дырки 1 частица Оже-эффект

19.09.12.

§ 6 Статистический метод Томаса Ферми

Метод основан на квазиклас. ≈. Почему можно применять квазикл. метод? ē, кот. нах. на выс. эл. оболочках - большие квантовые числа

1) Импульс пишем, как ф-ю координаты.
2) Использ. понятие о числе состояний в эл. фаз. объема

Число сост. в эл. фаз. объема: $dN = \frac{2\, d^3r\, d^3p}{(2\pi\hbar)^3}$ (два состояние ē две проекц. спина $\pm\frac{1}{2}$)

В осн. сост. заняты сост.-я: $0 \le p(\vec r) \le p_0(\vec r)$

$$\int\limits_{p\le p_0(\vec r)} d^3p = 4\pi\,\frac{p_0^3(\vec r)}{3}, \qquad dN = \frac{p_0^3(\vec r)\, d^3r}{3\pi^2\hbar^3}$$

$n(\vec r)$ - плотность электронов в ед. об.

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

$-e\varphi(\vec r)$ — потенц. эн. ē в атоме

$-e\varphi_0$ — max энергия д.б. постоянна во всем об. атома (ē не собираются ни в каких точках, где бы была эн. меньше)

φ - электростат. потенц.

$e \equiv |e|$

полная эн. ē: $\frac{p^2}{2m} - e\varphi(\vec r)$

max энергия ē в атоме:

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

$p_0(\vec r) = \sqrt{2me[\varphi - \varphi_0]}$ подставим в (*) $\Rightarrow n(\vec r) = \frac{(2me)^{3/2}[\varphi(r) - \varphi_0(r)]^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3}$

как определить электростат. потенциал $\Delta\varphi(\vec r) = -4\pi\rho(\vec r)$ ур. Пуассона; плотность заряда $=\rho(\vec r)$

$\rho(\vec r) = -e\,n(\vec r)$ $\qquad \Delta\varphi(\vec r) = 4\pi e\cdot n(\vec r)$

Атом сферич. симметр. $\Delta \varphi(\vec r) = 4\pi e n(\vec r)$

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

перейти к безразм. величинам $r = bZ^{-\frac{1}{3}}x$, $b = \frac{1}{2}\left(\frac{3\pi}{4}\right)^{\frac{2}{3}} \underbrace{\frac{\hbar^2}{me^2}}_{\text{Бор. радиус}}$

учет самосоглас. поля

$$e[\varphi(r) - \varphi_0] = \frac{Ze^2}{r}\varphi(x)$$

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

$$\downarrow$$

$$\frac{\cancel{4}e\,(\cancel{2me})^{3/2}\,\cancel{e^{3/2}}}{\cancel{2}^{3/2}\,\cancel{3\pi\hbar^3}}\,\frac{\cancel{3\pi}}{\cancel{4}}\cdot\frac{\cancel{\hbar^3}}{\cancel{m}^{3/2}\cancel{e^3}} = 1 \quad \to \text{сделать аккуратно!}$$

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

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

$$= \frac{1}{x}\varphi''(x)$$

$$\boxed{x^{1/2}\varphi''(x) = \varphi^{3/2}(x)} \quad (*)$$

ур-е Томаса Ферми

$\varphi(x)$ универсальна для всех атомов
$\varphi(x)$ – не зав. от Z

$\varphi(R) = \varphi_0 = 0$ гр. условие ($\bar e$ не может уйти за гр. атома)

R - граница атома

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

$\bar e$ не может уйти на $\infty \to \varphi(\infty) = 0$, $\varphi(0) = 1$

Это ур-е (*) аналитич. решить нельзя. Им можно польз. только тогда, когда применимо квазикл. ≈

$$\frac{m\hbar|F|}{|p|^3} \ll 1$$ – усл-е применимости квазикл. прибл.

пот. ядра

$$F = -\frac{dU(r)}{dr}, \quad U(r) = -\frac{Ze^2}{r}, \quad |p| \approx \sqrt{2m|U|} = \sqrt{\frac{2mZe^2}{r}}$$

$$|F| = \left|\frac{dU}{dr}\right| = \frac{Ze^2}{r^2}, \quad \frac{m\hbar Ze^2 \cdot r^{3/2}}{r^2(2mZ)^{3/2}e^3} \ll 1, \quad \frac{Z\hbar}{r^{1/2}\, 2^{3/2}\cdot m^{1/2}\, Z^{3/2}\cdot e} \ll 1$$

$$2^{3/2} \gg \frac{\hbar}{m^{1/2}Z^{1/2}e}, \quad r \gg \frac{\hbar^2}{me^2 Z}, \quad r \gg \frac{\hbar^2}{me^2}\cdot\frac{1}{Z}$$

огранич. со стор. малых r

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

$$r = bZ^{-\frac{1}{3}}x$$

ат. единицы

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{mc^2} \approx 0{,}529\cdot 10^{-10}\text{ м}$$

$$t_0 = \frac{\hbar^3}{me^4} \approx 2{,}42\cdot 10^{-17}\text{ сек}$$

$$E_0 = \frac{me^4}{\hbar^2} = 4{,}36\cdot 10^{-18}\text{ Дж} =$$

$$= 27{,}21\text{ эВ}$$

§7. Тонкая структура ат. уровней

нужно учесть спин $\bar{e}$, кот. движ. в атомах, чтобы учесть тонкую структуру.

псевдовектор – опр. спина. Нужно построить скаляр (потенц. эн. есть скаляр) произв. двух псевдовект.

↓

матр. Паули σ

$\hat{\vec{l}}_k \hat{\vec{S}}_k$ – спинорбитальное взаимод-е

$$\sum_k \alpha_k \hat{\vec{l}}_k \hat{\vec{S}}_k = \hat{U}_{\text{спорб.}} \rightarrow$$ оператор спинорбит. взаимод-я

скаляр

$\hat{\vec{S}}_i \hat{\vec{S}}_k$ – спин. спиновое взаимодействие

$\underbrace{S, L, J}$ - характериз. ат. как целое

Усреднить по волн функциям: 1) уср. по электр. сост. атома с зад. числами S и L → получим опер-р, содерж. хар-ки атома

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

S, L терм расщепл. из-за спинорбит. взаимод-я

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

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

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

$$E_J = \frac{1}{2} A J(J+1) \text{ - энергия расщепления}$$

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

энерг. не будет зависить от S и L (они одинак. для всех состояний)

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

расст. между ближ. уровнями

?

A м.б. полож. или отриц. 1) $A > 0$ $L+S \leq J \leq |L-S|$ верхн. $J = L+S$

„нормальный мультиплет"

Эмпирич. правило, кот. позв. опред. J для осн. ат.

2) $A < 0$

„обращенный мультиплет"

if в оболочке нах. не более половины, max возможного для ней числа $\bar{e}$, то $J = |L-S|$. Если же обол. заполн. > чем на половину, то $J = L+S$

p^6 if $e-2$ $|L-S|$

$e-4$ $|L+S|$

Квадрат. по спину члены могут возникн. из спинорб. вз.

$$\hat{U} = B(\hat{\vec{L}}\hat{\vec{S}})^2 \quad \tilde{E}_J = \frac{1}{4} B \cdot J^2(J+1)^2$$

$\hat{\vec{S}}_i \Rightarrow \hat{\vec{S}}$ полн. момент ат.

$\hat{\vec{l}}_i \to \hat{\vec{L}}$

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

L-S связь (Рассел-Саундерсовская связь)

$\vec{j}_i = \hat{\vec{s}}_i + \hat{\vec{l}}_i$ $\vec{j}_i \to \vec{J}$ J-J связь

26.09.12.

§8. Периодическая система элементов Менделеева

1869г. Д.И. Менделеев установил период. з-н

1921-22г. Н. Бор получилНоб. пр.

предсказал > 10 элементов скандий, галлий, германий

Хим. св-ва атомов зависят от $\bar{e}$, кот. нах. в последней незаполн. об.

s $l=0$

p $l=1$

d $l=2$

f $l=3$

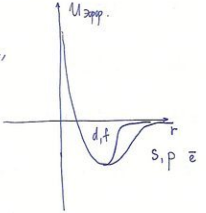
g

h

посмотреть на эфф. потенц. эн.

d и f $\bar{e}$ нах. глубоко внутри ат., на расст. < s, p $\bar{e}$.

d и f $\bar{e}$ слабо влияют на хим. св-ва атомов



$U_{эфф.}$ = кулоновская эн. + центробежная эн.

периоды ↔ группы ↕

	1 группа	2 группа	3	4	5	6	7	7
1	$_1$H							$_2$He
2	$_3$Li	$_4$Be	$_5$B	$_6$C	$_7$N	$_8$O	$_9$F	$_{10}$Ne
3	$_{11}$Na	$_{12}$Mg	$_{13}$Al	$_{14}$Si	$_{15}$P	$_{16}$S	$_{17}$Cl	$_{18}$Ar
4	$_{19}$K	$_{20}$Ca	~~не т.к.~~	~~пускаем у них~~	~~тут др~~	~~элементы термы~~	~~гр. железа, !!!!!~~	
4	$_{29}$Cu*	$_{30}$Zn	$_{31}$Ga	$_{32}$Ge	$_{33}$As	$_{34}$Se	$_{35}$Br	$_{36}$Cr
	$^2S_{1/2}$	$^1S_0$	$^2P_{\frac{1}{2}}$	$^3P_0$	$^4S_{3/2}$	$^3P_2$	$^2P_{3/2}$	$^1S_0$

щелочные мет

щелочно-земельные мет

$n = l+1$

$2(2l+1)$

галлогены

1s 2s 3s 4s 5s 6s

2p 3p 4p 5p 6p

3d 4d 5d 6d

4f 5f 6f

5g 6g

^{29}Cu* исключение → | элемент гр железа |

пишем термы основных состояний: $^{2S+1}L_J$

$_1H$ $1s$ $L=0$ $S=\frac{1}{2}$ $J=\frac{1}{2}$ $^2S_{\frac{1}{2}}$

1ē должен нах. в наинизш. сост.

собп. с l ē — собп. с s ē

$_2He$ $1s^2$ $L=0$ $S=0$ $J=0$ $\underline{^1S_0}$ | для всех атомов, у кот. полн. заполн. ē оболочки

↑ электронная конфигурация — $\frac{1}{2}\uparrow\downarrow-\frac{1}{2}$ — термы

$_3Li$ $1s^2 2s^1$ $^2S_{\frac{1}{2}}$

$_4Be$ $1s^2 2s^2$ $^1S_0$

пр-ло Хунда

$_5B$ $1s^2 2s^2 2p^1$ $L=1$ $S=\frac{1}{2}$ $J=\frac{1}{2}$ $^2P_{1/2}$

$_6C$ $1s^2 2s^2 2p^2$ ↑↑ (1 0) спины в одном направлении орб. мом. $= 1$ и 0 | $L=1$ $S=1$ $J=0$ $^3P_0$

$_7N$ $1s^2 2s^2 2p^3$ ↑↑↑ (1 0 −1) $L=0$ $S=\frac{3}{2}$ $J=\frac{3}{2}$ $^4S_{\frac{3}{2}}$

$_8O$ $1s^2 2s^2 2p^4$ ↑↑↑↓ (1 0 −1 1) $L=1$ $S=1$ $J=2$ $^3P_2$

$_9F$ $1s^2 2s^2 2p^5$ ↑↑↑↓↓ (1 0 −1 1 0) $L=1$ $S=\frac{1}{2}$ $J=\frac{3}{2}$ $^2P_{\frac{3}{2}}$

$_{10}Ne$ $1s^2 2s^2 2p^6$ ↑↑↑↓↓↓ (1 0 −1 1 0 −1) $L=0$ $S=0$ $J=0$ $\underline{^1S_0}$

$_{11}Na$ ..... $3s^1$

$_{12}Mg$ ... $3s^2$

$_{13}Al$ .... $3s^2 3p^1$

$_{14}Si$ .... $3p^2$

$_{15}P$ ... $3p^3$

$_{16}S$ ..... $3p^4$

$_{17}Cl$ ... $3p^5$

$_{18}Ar$ .... $3p^6$

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

Элементы главных групп - эл-ты у кот. заполняются s, p - оболочки

Элементы промежут. групп: - d, f - оболочки

3d - элементы группы железа

4d - эл. гр. палладия

5d - эл. гр. платины

4f - лантаноиды

5f - актиноиды

$\boxed{\text{Элементы группы железа:}}$

терм осн. состояния

$_{21}Sc$ скандий .... $3d$ $L=2$ $S=\frac{1}{2}$ $J=\frac{3}{2}$ $^2D_{\frac{3}{2}}$

$_{22}Ti$ титан .... $3d^2$ $\underset{2}{\uparrow}\ \underset{1}{\uparrow}$ $L=3$ $S=1$ $J=2$ $^3F_2$

$_{23}V$ ... $3d^3$ $\underset{2}{\uparrow}\ \underset{1}{\uparrow}\ \underset{0}{\uparrow}$ $L=3$ $S=\frac{3}{2}$ $J=\frac{3}{2}$ $^4F_{3/2}$

$_{24}Cr^{*}$ $\underline{4s3d^5}$ $\underset{2}{\uparrow}\ \underset{1}{\uparrow}\ \underset{0}{\uparrow}\ \underset{-1}{\uparrow}\ \underset{-2}{\uparrow}$ $\underbrace{L=0 \quad S=\frac{5}{2}}$

! исключение

$L=0$ $S=3$ $J=3$ $^7S_3$

для s-обол.

$_{25}Mn$ марганец ... $4s^2 3d^5$ $^6S_{5/2}$

$_{26}Fe$ ... $3d^6$ $\underset{2}{\uparrow}\ \underset{1}{\uparrow}\ \underset{0}{\uparrow}\ \underset{-1}{\uparrow}\ \underset{-2}{\uparrow}\ \underset{2}{\downarrow}$ $L=2$ $S=2$ $J=4$ $^5D_4$

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

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

$_{29}Cu^{*}$ .... $\underline{4s^1 3d^{10}}$ $^2S_{\frac{1}{2}}$

! исключение

$_{30}Zn$ ... $4s^2 3d^{10}$

$_{31}Ga$ галлий ... $4s^2 3d^{10} 4p^1$

$_{32}Ge$ германий ... $4p^2$

$_{33}As$ ... $4p^3$

$_{34}Se$ селен ... $4p^4$

$_{35}Br$ ... $4p^5$

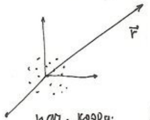
$_{36}Cr$ .... $4p^6$

03.10.12.

§ 9. Мультипольные моменты

$$\varphi(\vec r) = \sum_{\alpha=1}^{Z} \frac{e_\alpha}{|\vec r - \vec r_\alpha|} \approx$$ — электростат. потенциал сист. зарядов

$\vec r_\alpha$ — рад.-вект. i-ой частицы



нач. коорд. расположено в цр. системы

$r \gg R_{ат.}$ большие расст.

// электростат. потенц. можно разложить в ряд →* //

$q = \sum_{\alpha=1}^{Z} e_\alpha$ $\quad \vec d = \sum_{\alpha=1}^{Z} e_\alpha \vec r_\alpha$ — дип. момент (вектор)

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

$$\approx^{*} \underbrace{\frac{q}{r}}_{\text{ряд}} + \underbrace{\frac{\vec d \vec r}{r^3}}_{\text{дип. момент}} + \frac{1}{6}\sum_{j,k} \underbrace{Q_{jk}}_{\text{квадруп. момент}} \frac{\partial^2}{\partial r_j \partial r_k}\frac{1}{r} + \dots$$

дип. момент

октупольный гексадекапольный

$$Q_{jk} = \sum_{\alpha=1}^{Z} e_\alpha [3x_j^{(\alpha)} x_k^{(\alpha)} - \underbrace{\delta_{jk} \vec r_\alpha^{\,2}}]$$ тензор квадруп. момента

этот член выбир. из сообр. чтобы Sp тензора был = 0

Sp: $\sum_k Q_{kk} = 0$, $\quad Q_{jk} = Q_{kj}$

шпур

тензор симметричен

клас. электродин-ка → переход к кв. мех → заменяем величины операторами

$$\langle \psi_f | \hat{\vec d} | \psi_i \rangle = \sum_{\alpha=1}^{Z} e_\alpha \int d^3r_1 d^3r_2 \dots d^3r_\alpha \dots d^3r_Z \cdot \psi_f^*(\vec r_1, \vec r_2, \dots \vec r_\alpha, \dots \vec r_Z) \vec r_\alpha \psi_i(\vec r_1, \vec r_2, \dots \vec r_\alpha, \dots \vec r_Z) =$$

$$\rho_{if}(\vec r_\alpha) = \int d^3r_1 d^3r_2 \dots \underline{d^3r_{\alpha-1} d^3r_{\alpha+1} \dots} d^3r_Z \, \psi_f^*(\,) \psi_i(\,)$$ — есть функционал от r_α

! нет $\int$ по d^3r_α!

→ это переходная плотность

if нач. сост. совп. с конечным $f = i$ $\quad \rho_{ii}(\vec r_\alpha) = \rho(\vec r_\alpha)$ — одночастичная плотность

$$= \sum_{\alpha=1}^{Z} e_\alpha \int d^3r_\alpha \, \vec r_\alpha \, \rho_{if}(\vec r_\alpha)$$

$$\langle \psi_i | \vec{d} | \psi_i \rangle = \sum_{\alpha=1}^{Z} e_\alpha \int d^3 r_\alpha \, \vec{r}_\alpha \, \rho(\vec{r}_\alpha) = 0$$ ср. знач. матр. эл. = 0

if сист. облад. опред. четностью при замене $\vec{r}_\alpha \to -\vec{r}_\alpha$ то

в.ф. либо будет не изменна либо изменит знак, r_α - поменяет знак

квадр. момент $\langle \psi_f | \hat{Q}_{jk} | \psi_i \rangle$ либо ищем ср. знач. $\langle \psi_i | \hat{Q}_{jk} | \psi_i \rangle$

вычислять такой матр. элемент

$\forall$ атом можно хар-ть полным моментом $\vec{J}$, (J, M_J)

$$\hat{Q}_{jk} = C\left(\hat{J}_j \hat{J}_k + \hat{J}_k \hat{J}_j \underbrace{- \tfrac{2}{3} \delta_{jk} \hat{\vec{J}}^2}_{\text{чтобы } Sp. = 0} \right)$$

нормиров. const-a

моменты не коммут. др. с др.

if $J = 0$ (полный момент = 0) $\hat{Q}_{jk} = 0$

$J = \frac{1}{2}$ $\quad J^2 = \frac{1}{4} \hat{\sigma}^2 = \frac{3}{4}$, $\quad \hat{J}_j \hat{J}_k + \hat{J}_k \hat{J}_j = \frac{1}{4}(\hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_k + \hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_j) = \frac{1}{2} \delta_{jk}$

$J^2 = J(J+1) = \frac{3}{4}$ $\quad \hat{Q}_{jk} = 0$

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

квадр. момент (приводится в таблице) $\quad M_J = J \qquad \langle JJ | \hat{J}_z | JJ \rangle = J$

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

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

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

$$\hat Q_{zz} = \frac{3Q}{J(2J-1)}\left(\hat J_z^2 - \frac{1}{3}\hat J^2\right), \quad J\neq 0,\ J\neq \frac{1}{2}$$

if $\langle \hat J_z\rangle = M$ – проекция произвольна; $\langle \hat Q_{zz}\rangle = \frac{3Q}{J(2J-1)}\left(M^2-\frac{1}{3}J(J+1)\right)$ $\quad J\neq 0,\ J\neq\frac{1}{2}$

§10. Атом в электрическом поле

в дост. слабом поле — эфф. изменения уровней в ат. – эфф. Штарка

поля малые, по сравн. с внутриат. эл. полями $\mathcal{E}_0 = \frac{e}{a_0^2}\approx 5{,}1\cdot 10^9$ В/см

хар.-я велич. внутриат. эл. поля; a_0 – рад. 1-ой бор. орбиты

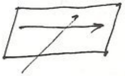
Штарк 1923 год:

поля $\mathcal{E} \leqslant 10^5 \frac{\text{В}}{\text{см}} \ll \mathcal{E}_0$ ⇒ можем пользоваться теорией возмущений

рассматрив. поля

ат. помещ. во внешн. однор. эл. поле – поле не будет центр.-симметр.
в таком поле не будет сохр. полный момент – будет сохр. проекц. полного мом. на напр-е поля. Состояния с разн. знач. M_J будут облад. разн. эн.
Эл. поле снимает вырождение по M (но это снятие вырожд. будет не полным).

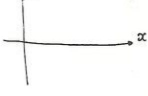
Атом симметр. по отнош. к отражению в ∀ напр. в пл-ти эл. поля



отражение относит. плоскости, проход. по напр. поля (содержит напр-е поля)

↓

M_J меняет знак



сост. с M_J, $-M_J$ облад. одинак. энергией → двукратное вырожд. уровней (в эл. поле мы снять не можем)

Что явл. опер.-м возмущения? Деформация системы во вн. поле → <u>поляризуемость</u>
(поляризация – выстраивание спинов)

опер. возмущ. $\hat{V} = -\hat{\vec{d}}\vec{\mathcal{E}}$ удобно выбр. ось z в напр. поля

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

гамильт.

в.ф. атома обладает опред-й четностью

хар-ся (n, ℓ)

$$\psi_{n\ell}^{(0)}(\vec{r}) = \sum_{m=-\ell}^{\ell} C_m \psi_{n\ell m}^{(0)}(\vec{r})$$

в.ф. многоэлектр-го атома

(n, ℓ, m)
$\downarrow$
не наблюд. величина

в первом $\approx$ в теор. возмущений поправка $= 0$, в силу $\langle \hat{d}_z \rangle = 0$

Поправку должны искать в 2-ом приближении.
Попр. к энергии осн-го сост-я:

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

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

$\Delta E_n = -\frac{1}{2}\alpha_{zz}^{(n)} \mathcal{E}^2$ Эффект квадратичен по полю! } осн. физ. смысл

Исключение: ат. <u>водорода</u> $\rightarrow$ эфф. линеен по полю

сост-е с опред. ℓ имеет четность $(-1)^\ell$

Сост-я ат. водор. вырождены по $\underline{\underline{\ell}}$

$$\psi_n^{(0)}(\vec{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} C_{\ell m} \psi_{n\ell m}^{(0)}(\vec{r})$$

в.ф. есть суперпозиция сост. с опред. ℓ и не облад. опред. четностью

ср. зн. $\neq 0$ $\langle \hat{d}_z \rangle \neq 0$

$\Delta E_n \sim \mathcal{E}$

10.10.12

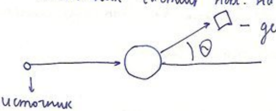
31.10 - ректорская к/р.

Глава 2. Упругое и неупругое рассеяние

§1. Общая теория рассеяния

Кв. теор. расс. - нет траектории (в отлич. от класс.) нет прицел. пар-ра, можем только указать, что частица отклон. на угол.

Источник частиц нах. на $-\infty$; имеется область, где потенциал отличен от нуля;



частица провзаимод-ла и отклонилась на $\angle\theta$

своб. частицы - им сопоставл. плоская волна $\psi(\vec r) = e^{ikz}$

плоская волна нормир-на т.о., что плотность потока вер-ти по абс. величине равна скорости.

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

$$\boxed{|\vec j_{пад.}| = \frac{\hbar k}{m} = v}$$

вдали от рассеивателя

$R_{kl}(r) \sim \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2})}{kr}$ - стоячая волна

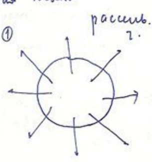
$$A\frac{e^{ikr}}{r} + B\frac{e^{-ikr}}{r}$$ - сферически сход. волна

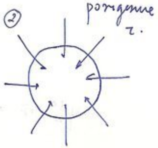
(1) $\vec j = \frac{\hbar k}{mr^2}\cdot\frac{\vec r}{r} = \frac{\vec v}{r^2}$

(2) $\vec j = -\frac{\vec v}{r^2}$

Сферически расходящаяся волна (описывает рассеяние частиц)

сферич. сход. волна (описывает рождение частиц)





сфера, где происх. взаимод-е (стрелочки → это направление плотности потока вер-ти)

ГРАНИЧНОЕ УСЛОВИЕ

$$r \to \infty \quad \psi(\vec r) \approx e^{ikz} + f(\Theta)\underbrace{\frac{e^{ikr}}{r}}, \quad * $$

$f(\Theta)$ - амплитуда рассеяния

размерность длины имеет

сферич. расход. волна

$$|\vec j_{расс.}| = \frac{v}{r^2}|f(\Theta)|^2$$

[Вероятность пройти частицы через элемент $dS = r^2 d\Omega$:

$|\vec j_{расс.}|\, dS = v|f(\Theta)|^2 d\Omega$

$$\frac{|\vec j_{расс.}|\,dS}{|\vec j_{пад.}|} = \underline{\underline{d\sigma}} = |f(\Theta)|^2 d\Omega$$

дифф-е сечение расс. размерность $[м^2]$ $\boxed{1\ барн = 10^{-24}\ см^2 = 10^{-28}\ м^2}$

$d\Omega = 2\pi \sin\Theta\, d\Theta \qquad d\sigma = 2\pi |f(\Theta)|^2 \sin\Theta\, d\Theta$

$$\boxed{\sigma = \int d\sigma = 2\pi \int_0^\pi d\Theta \sin\Theta\, |f(\Theta)|^2}$$ интегральное сечение

* Суперпозиция плоской и сферич. расход. волн на бесконечности (гран. усл-е)

$$\underbrace{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r}\right)}_{\text{рад. часть}} - \underbrace{\frac{\vec{l}^{\,2}}{r^2}\psi}_{\text{орб. мом}} + \frac{2m}{\hbar^2}[V(r) - E]\psi = 0$$

в центр-сим. поле ур-е Шредингера

в. ф. будем искать в виде разложения по полиномам Лежандра:

$$\psi = \sum_{l=0}^{\infty} C_l P_l(\cos\Theta) R_{kl}(r), \qquad \hat{l}^2 P_l(\cos\Theta) = l(l+1) P_l(\cos\Theta)$$

собств. ф.

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR_{kl}}{dr}\right) + \frac{2m}{\hbar^2}\left[V(r) - E - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right] R_{kl} = 0 \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$ волн. в-р

$r \to \infty \quad R_{kl} \sim \dfrac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2})}{kr}$ (для своб. движения), if есть $V(r)$

$V(r) \neq 0, \quad R_{kl} \sim \dfrac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l)}{kr}$, δ_l - фаза рассеяния

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos\theta)$$ разложение плоской волны по полиномам Лежандра

асимптотика $r \to \infty$, $j_l(kr) \approx \dfrac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2})}{kr}$

$$e^{ikz} \sim \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\left[(-1)^{l+1} e^{-ikr} + e^{ikr}\right] P_l(\cos\theta)$$ → асимптотика пл. волны

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

$$r \to \infty \quad \psi \approx \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} C_l \left[(-i)^l e^{i(kr+\delta_l)} - i^l e^{-i(kr+\delta_l)}\right] P_l(\cos\theta)$$ → асимптотика в. ф.

$$\psi \approx e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta), \quad r \to \infty$$

Найдем коэф. C_l из условия, что коэф. при сфер. сход. волне $= 0$

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

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

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

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

ф-ла для амплитуды рассеяния в виде разлож. по полиномам Лежандра (парциальным волнам)

ф-ла Факсена-Хольтсмарка

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

Как найти фазы рассеяния?

фазовый анализ: нахожд-е фаз по эксперимент. данным

матричный элемент в l-представлении

опр-р рассеяния $\hat{S}$, $\hat{S}\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r})$ $\hat{S}$ - матрица (называют)

$\psi(\vec{r}) - \psi(\vec{r}) = (\hat{S} - 1)\psi(\vec{r})$ $S_l = e^{2i\delta_l}$ - диаг. матр. элемент матрицы рассеяния в l-представлении

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

$|\hat{S}\psi|^2 = 1$ $\hat{S}^+\hat{S} = 1$ - унитарный оператор

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

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

опр-р эволюции

Определим интег. сеч. рассеяния

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

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

Св-во ортонорм-ти полиномов Лежандра

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

(здесь δ_l - вещест.)

сечение упругого рассеяния (elastic)

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

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

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\underline{f_l}\,P_l(\cos\theta)$$

парц-я амплитуда

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

$f_l = \frac{e^{i\delta_l}}{k}\sin\delta_l$ $(\sigma_l)_{max} = \frac{4\pi}{k^2}(2l+1)$

17.10.12.

Формула Борна (Борновское приближение)

Приближенное решение - воспольз. теорией возмущений

Предполагаем, что взаимод-е мало. Получим первое борновское ≈ - 1-ый член борновского ряда.

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

$$\Delta\psi(\vec r)+k^2\psi(\vec r)=\frac{2m}{\hbar^2}U(\vec r)\psi(\vec r)$$ → точное ур-е Шредингера

Точно решить нельзя. Считаем, что правая часть мала.

$$\Delta\psi^{(0)}(\vec r)+k^2\psi^{(0)}(\vec r)=0\quad (*),\quad \psi(\vec r)=\psi^{(0)}(\vec r)+\psi^{(1)}(\vec r)+\dots$$

$e^{i\vec k\vec r}$, $e^{-i\vec k\vec r}$ - решение этого ур-я $\quad e^{i\vec k\vec r}=e^{ikz}$

$$\Delta\psi^{(1)}(\vec r)+k^2\psi^{(1)}(\vec r)=\frac{2m}{\hbar^2}U(\vec r)\psi^{(0)}(\vec r)$$ → ур-е для нахождения первой поправки к волн. функции

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

здесь остается только $\psi^{(1)}$ т.к $\psi^{(0)}$ удовлетвор. невозмущ. ур. (*)

Собств. ф-ции оператора Δ - плоские волны $e^{i\vec k\vec r}$, $e^{-i\vec k\vec r}$

$$U(\vec r)\psi^{(0)}(\vec r)=\int d^3\varkappa\, e^{i\vec\varkappa\vec r}\chi(\vec\varkappa)$$ разложим в инт. Фурье

(непр. спектр) $\quad e^{i\vec\varkappa\vec r}$ - собств. ф-ции опер-ра Δ

Обращение Фурье: $\chi(\vec\varkappa)=\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3r'\, e^{-i\vec\varkappa\vec r'}U(\vec r')\psi^{(0)}(\vec r')$

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

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

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

$$d^3\varkappa = \varkappa^2 \sin\Theta \, d\varkappa \, d\Theta_\varkappa \, d\varphi_\varkappa \qquad \left\{ \begin{array}{l} \cos\Theta_\varkappa = t \\ -\sin\Theta_\varkappa \, d\Theta_\varkappa = dt \qquad t\Big|_{1}^{-1} \end{array} \right\}$$

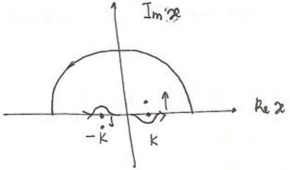
$$\int_0^{2\pi} d\varphi_\varkappa \int_0^{\pi} d\Theta_\varkappa \sin\Theta_\varkappa \, e^{i\varkappa|\vec r - \vec r'|\cos\Theta_\varkappa} = 2\pi \int_{-1}^{1} dt \, e^{i\varkappa|\vec r - \vec r'| t} = \frac{2\pi}{i\varkappa|\vec r - \vec r'|} \cdot$$

$$\cdot \left[e^{i\varkappa|\vec r - \vec r'|} - e^{-i\varkappa|\vec r - \vec r'|} \right]$$

$$G(\vec r - \vec r') = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{i|\vec r - \vec r'|} \int_0^{\infty} \frac{d\varkappa \, \varkappa}{K^2 - \varkappa^2} \Big[e^{i\varkappa|\vec r - \vec r'|} \underbrace{- e^{-i\varkappa|\vec r - \vec r'|}}_{\text{заменим } \varkappa \to -\varkappa \text{ во 2-ом интеграле}} \Big] =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2 i |\vec r - \vec r'|} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\varkappa \, \varkappa}{K^2 - \varkappa^2} e^{i\varkappa|\vec r - \vec r'|} =$$

по лемме Жордана замыкаем контур



$$= \left\{ \frac{1}{(2\pi)^2 |\vec r - \vec r'|} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\varkappa \, \varkappa \, e^{i\varkappa|\vec r - \vec r'|}}{(\varkappa - K - i0)(\varkappa + K + i0)} = \right.$$

сдвинул полюса на ∞ мал. велич.

$K \to K + i0$ сдвиг полюсов связан с гран. условием

сферически-расход. волну получим.

$$= \underbrace{G^{(+)}}_{\text{имеет в асимптотике}}(\vec r - \vec r') \Big\} = \quad = - \frac{\overset{-2\pi i}{\cancel{K}} \cdot e^{iK|\vec r - \vec r'|}}{2\pi |\vec r - \vec r'| \cdot 2\cancel{K}}$$

$\underline{\varkappa = K}$
сумма вычетов в полюсе

$G^{(-)}$ – сферич-сход. волну

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

$r \to \infty$
найдем асимптотику ф. Грина.

$|\vec r - \vec r'|$ – ? $\vec r'$ – ограничено

под знаком $\int$ стоит потенц. энерг. $U(\vec r')$

$$|\vec r - \vec r'| = \sqrt{r^2 + r'^2 - 2\vec r \vec r'} =$$
$$= r\sqrt{1 - \frac{2\vec r \vec r'}{r^2} + \frac{r'^2}{r^2}} =$$

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

$$G^{(+)}(\vec r-\vec r')\approx -\frac{e^{ikr-ik\frac{\vec r\cdot\vec r'}{r^2}}}{4\pi r}=$$

$\left\{\frac{k\vec r}{r}=\vec k'\right.$ волновой вектор рассеянной частицы

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

$$\psi^{(1)}(\vec r)=\frac{2m}{\hbar^2}\int d^3r'\cdot G^{(+)}(\vec r-\vec r')\,U(\vec r')\,e^{i\vec k\vec r'}$$

сферически расход. волна есть в асимптотике

при $r\to\infty$ $\psi^{(1)}(\vec r)\approx-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{ikr}}{r}\cdot\int d^3r'\cdot e^{i(\vec k-\vec k')\vec r'}\,U(\vec r')$

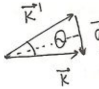
на больших расст. от рассеив. центра

$r\to\infty$ $\psi^{(1)}(\vec r)=e^{i\vec k\vec r}+f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}$ $\qquad \vec k-\vec k'=\vec q$ — переданный импульс, изменение импульса при рассеянии

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

ф-ла Борна, первое борновское приближение для рассеяния

в случае упругого рассеяния elastic $\Rightarrow|\vec k|=|\vec k'|=k$



частица рассеялась на угол θ

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

$U(\vec r)\equiv U(r)$ центрально-сим. поле $\Rightarrow$ можно проинтегрир. по углам

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

Условие применимости Борновского $\approx$

требуем $|\psi^{(1)}|\ll|\psi^{(0)}|$ - теория приближ. работает

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

Центр.-сим. поле:

$$\frac{m}{\cancel{2\pi}\hbar^2}\frac{\cancel{2\pi}}{k}\left|\int_0^\infty dr'\cdot U(r')\left[e^{2ikr'}-1\right]\right| \ll 1$$

2 Случая: 1. случай быстрых частиц $\quad U(r')\neq 0,\ r'\leq d$

2. случай медленных частиц. $\quad d$ - радиус потенциала

I) медленные частицы $\boxed{kd \ll 1}$, разлагаем в ряд

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

$$\tilde{U} = \frac{2}{d^2}\left|\int_0^\infty dr\cdot r\,U(r)\right|,$$ характерная величина потенц. энергии

$$\frac{\tilde{U}\,m\,d^2}{\hbar^2} \ll 1, \quad \boxed{\tilde{U} \ll \frac{\hbar^2}{md^2}}$$ - условие применимости борн. ≈ для медл. частиц ($kd \ll 1$)

$$\tilde{E} = \frac{\hbar^2}{2md^2}$$ - энергия, необх. для локализ. частицы в области пр-ва с лин. размером d

II) быстрые $\boxed{kd \gg 1}$, $\quad \bar{U} = \frac{1}{d}\left|\int_0^\infty dr\,U(r)\right|, \quad \frac{m\bar{U}d^2}{\hbar^2 kd} \ll 1$

экспонента - быстро осциллир. множит. → пренебрегаем его.

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

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

if борновское ≈ применимо для медленных частиц, то для быстрых оно тем более применимо

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

24.10.12

§3. Рассеяние медленных частиц

$kd \ll 1$ d - рад. действия потенциала медленные частицы

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

$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$ 1) $\underbrace{d \ll r}_{\cancel{U(r)}} \underbrace{\ll \frac{1}{k}}_{\cancel{k^2}}$ рассмотрим эту область

в этой обл-ти ур. Шредингера принимает вид

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

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

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

2) $r \gtrsim \frac{\sqrt{l(l+1)}}{k}$ в этой области стан. существ. член с k^2

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

реш-е: $R_{kl}(r) = A_1 j_l(kr) + A_2 n_l(kr)$ сферич. ф-ции Бесселя и Неймана

Эти решения должны переходить одно в другое

взять асимптот. ф. Б. и Н. при малом значении аргумента:

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

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

$kr \gg 1$ асимптотики

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

$kr \gg 1$

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

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

$$\operatorname{tg} \delta_l = \frac{k^{2l+1}\, C_2}{(2l+1)!!\,(2l-1)!!\, C_1}; \quad R_{kl}(r) = \frac{(2l+1)!!\, C_1}{k^{l+1} r \cos\delta_l} \left\{ \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) \cos\delta_l + \right.$$

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

δ_l - малое т.к $kd \ll 1$ $\quad \operatorname{tg}\delta_l \approx \delta_l \sim k^{2l+1}$ $\quad \boxed{\delta_l \sim k^{2l+1}}$

$$f_l = \frac{1}{2ik}\left(e^{2i\delta_l} - 1\right) \approx \frac{\delta_l}{k} \sim k^{2l} \quad \left| \begin{matrix} \text{парциальная} \\ \text{амплитуда} \end{matrix} \right|$$

фаза зависит таким образом от энергии

фаза δ_0 будет самая большая.

Она дает основной вклад в рассеяние.

Можно отбросить все фазы, кроме δ_0, $kd \ll 1$

$f(\Theta) = f_0 = \frac{\delta_0}{k} = \frac{C_2}{C_1}$ (от энергии не зависит) $= -a$

$\frac{C_2}{C_1} = -a = f_0$ $\quad \underline{a}$ - „длина рассеяния"

$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |a|^2$ - диф. сеч. $\quad \sigma = 4\pi |a|^2$ - интегр. сечение

(в 4π раз больше, чем рассеяние на твердом шарике радиуса a в клас. мех)

Сечение не зависит от энергии и от Θ - угла рассеяния.

§4 Рассеяние зар. частицы кулоновским полем

для непр. спектра

решим в борновском приближении

$U(r) = \frac{\alpha}{r}$ - кулоновский потенциал $\qquad \alpha = \pm Z_1 Z_2 e^2 = \text{const}$

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^\infty dr \cdot r \sin qr\, U(r)$$ if подставить $U(r)$, то $\int$ - расходится

Возьмем $U(r) = \frac{\alpha}{r} e^{-\gamma r}$ $(\gamma > 0)$ - экранированный Кул. потенциал (потенциал Юкава)

$$f(\theta) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2 q}\int_0^\infty dr \sin qr\, e^{-\gamma r} = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2 q}\,\mathrm{Im}\int_0^\infty dr\, e^{-\gamma r + iqr} = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2 q}\,\mathrm{Im}\left.\frac{e^{-\gamma r + iqr}}{-\gamma + iq}\right|_0^\infty =$$

$$= -\frac{2m\alpha}{\hbar^2 q}\,\mathrm{Im}\,\frac{1}{\gamma - iq} = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2 q}\,\mathrm{Im}\,\frac{\gamma + iq}{\gamma^2 + q^2} = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2(\gamma^2 + q^2)}$$

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

$$f(\theta) = -\frac{m\alpha}{2\hbar^2 k^2 \sin^2\frac{\theta}{2}}$$

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \left(\frac{\alpha}{2mv^2}\right)^2 \cdot \frac{1}{\sin^4\frac{\theta}{2}}}$$

ф-ла Резерфорда

$\{\hbar k = p = mv\}$ $\qquad f(\theta) = \frac{-\alpha}{2mv^2 \sin^2\frac{\theta}{2}}$

$\frac{E^2}{mv^2}$ имеет размерность длины (получается без использ. $\hbar$)

поэтому эта ф-ла одинакова как в КМ. так и в клас. мех.

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

$n = \frac{\alpha}{\hbar v}$ - такая величина абл. безразм.

(Зоммерфельд) кулоновский пар-р (пар-р Зоммерфельда)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{n}{2k}\right)^2 \cdot \frac{1}{\sin^4\frac{\theta}{2}} \qquad f_{кул}(\theta) = -\frac{\alpha}{2mv^2}\,\frac{\Gamma(1+in)}{\Gamma(1-in)} \cdot \frac{\exp(-2in \ln \sin\theta/2)}{\sin^2\frac{\theta}{2}}$$

гамма-ф. $\qquad$ фаз. множитель

Рассеяние точного заряда на другом точном заряде рассеяние $\bar{e}$ на атоме (как влияет не точечность зар. на р-з-т)

Рассеяние быстрых $\bar{e}$ атома (эн. д.б. настолько большой, чтобы польз. борновским $\approx$)

$$f(\Theta) = -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^\infty dr\cdot r\cdot \sin qr\, U(r) \qquad U(\vec r) = e\varphi(\vec r) \qquad \Delta\varphi(\vec r) = -4\pi\underbrace{\rho(\vec r)}_{\text{плотность заряда}}$$

$$\varphi(\vec q) = \int d^3r\, \varphi(\vec r) e^{i\vec q\vec r} \quad \text{преобр. Фурье}$$

$$\varphi(\vec r) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3q\, \varphi(\vec q)\, e^{-i\vec q\vec r} \quad \text{- обр. преобр. Фурье} \qquad \rho(\vec q) = \int d^3r\, \rho(\vec r) e^{i\vec q\vec r}$$

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

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

$$\rho(\vec r) = -e\underbrace{n(\vec r)}_{\substack{\text{плотность } \bar{e}\text{.ов} \\ \text{(частиц)}}} + Ze\delta(\vec r), \qquad \int d^3r\, n(\vec r) = Z \quad \text{плотность электронов нормирована так}$$

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

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

ф-ла Борна

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

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

07.11.12.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{e^2}{2mv^2}\right)^2 \cdot \frac{[Z - F(q)]^2}{\sin^4\frac{\theta}{2}}$$ $F(q) = \int d^3r\, n(\vec r) e^{i\vec q\vec r}$ – форм-фактор,

$F(0) = Z$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{e^2 Z}{2mv^2}\right)^2 \frac{\left(1 - \frac{F(q)}{Z}\right)^2}{\sin^4\frac{\theta}{2}} \longrightarrow$$ множитель связан с неточечностью заряда, на кот. расс. $\bar e$
(в этом отличие от ф-лы Резерфорда)

$n(\vec r) = n(r)$ – распределение заряда в ат. сферич. симметрично

$q = 2k\sin\frac{\theta}{2}$ малые углы $\to qa_0 \ll 1$ a_0 – рад. первой Бор. орбиты

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

разложим форм-фактор в ряд:

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

$$= Z\left(1 - \frac{q^2\langle r^2\rangle}{6}\right)$$ $\int d^3r\, n(r) = Z$

$\vec q\vec r = qr\cdot\cos\theta$

$$\int_0^\pi d\theta \sin\theta\cos\theta = 0, \quad 2\pi\int_0^\pi d\theta\sin\theta\cos^2\theta = \left\{ \begin{matrix}\cos\theta = t \\ -\sin\theta\, d\theta = dt\end{matrix} \quad t\Big|_1^{-1}\right\} =$$

$$= 2\pi\cdot\frac{2}{3} = \frac{4\pi}{3}, \quad \int d^3r\, n(r)\frac{(\vec q\vec r)^2}{2} = \frac{q^2}{6}\underbrace{4\pi}_{\int d\Omega}\int_0^\infty dr\cdot r^4 n(r) = \frac{q^2}{6}\underbrace{\int d^3r\, r^2 n(r)}_{Z\langle r^2\rangle} =$$

$4\pi = \int d\Omega$ $$= \frac{Zq^2\langle r^2\rangle}{6}$$

$$f(\theta) = -\frac{2me^2}{\hbar^2 q^2}[Z - F(\vec q)] = -\frac{\cancel{2}me^2 Z \cancel{q^2}\langle r^2\rangle}{\hbar^2 \cancel{q^2}\cancel{6}3}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{Zme^2\langle r^2\rangle}{3\hbar^2}\right)^2$$ – рассеяние на малые углы не зависит от угла расс., а зав. от средне-квадр. рад. атома

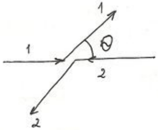
Сечение изотропно, не зав. от θ и опред. ср. квадр. рад. атома

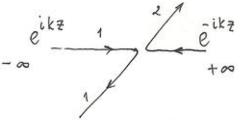
Большие углы ⇒ обычное резерфорд. рассеяние (exp. быстро затухает, форм-фактор станов. не существенным)

§ 5. Столкновения тожд-х частиц

приводит к появл. обменного взаимодействия

в сист. ц. масс if рассеив. две тожд. частицы





← Эти две картины рассеяния в кв. мех. в силу тождественности частиц неразличимы

Какими в. ф. будем описывать?

Симметрия в.ф. в сист. тожд. частиц (все зав-т от спинов частиц)

$s \to S$ - суммарный спин сист. 2-х частиц

$\downarrow$

спин каждой частицы

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

коэф-ты Клебша-Гордана

$$(sm_1\, sm_2\,|\,SM)=(-1)^{2s-S}(sm_2\, sm_1\,|\,SM)$$ - св-во симметрии коэф-в К-Г.

Полная в.ф.: $\Psi_{SM}(1,2)=\psi^{\text{коорд.}}_{SM}(1,2)\,\chi_{SM}(1,2)$

спиновая часть в.ф.

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

пр-п Паули вып-ся, if s- целое в.ф.- симметричная
s- полуцелое в.ф.- антисимметр.

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

$\psi^{\text{коорд}}_{SM}=(-1)^{S}\psi^{\text{коорд}}_{SM}(2,1)$ так меняется коорд. часть в.ф. 2-х т. частиц, if мы их поменяем местами инверсия: $z = r\cdot\cos\theta \to -z$

$r \to r \quad \theta \to \pi - \theta \quad \varphi \to \varphi + \pi \quad z \to -z$

$r \to \infty$ асимптотику в.ф. на больш. расст-х

$\psi(\vec r) = e^{ikz} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} \pm$ плоск. волна и сферич. расход. волна

$\pm\left[e^{-ikz} + f(\pi-\theta)\frac{e^{ikr}}{r}\right]$ Коорд. часть в.ф.

суммарн. спин! S - четный тогда сечение $d\sigma_S = |f(\theta) + f(\pi-\theta)|^2 d\Omega$

S - нч. $d\sigma_A = |f(\theta) - f(\pi-\theta)|^2 d\Omega$

для медленных частиц $f(\theta) = -a$, a - длина рассеяния

$d\sigma_S^{(0)} = 4|a|^2 d\Omega \qquad d\sigma_A^{(0)} = 0$ if сум. спин неч. то частицы не рассеиваются

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

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

$d\sigma_{кл} = \left[|f(\theta)|^2 + |f(\pi-\theta)|^2\right] d\Omega$ в кв. мех появл. интерфер. члены

в класс. мех. нет интерф. ч.

if мишень и пучок не поляризованы, то нужно произвести усреднение по спинам

$s \quad (2s+1)^2 \to$ число спин. состояний для двух частиц

две част. if четн. s $\quad (s+1)(2s+1)$ с четн. S

$\underbrace{s(2s+1)}_{\text{число состояний}}$ с неч. S

if нечетн. s $\quad s(2s+1)$ с четн. S

$(s+1)(2s+1)$ с неч. S

Статистические веса

1. Бозоны $\quad W_e^B = \frac{S+1}{2S+1} \quad W_0^B = \frac{S}{2S+1}$

целый S $\quad$ стат. вес сост. с четн. спином S $\quad$ с неч. сп.

$$d\sigma_B = W_e^B d\sigma_S + W_0^B d\sigma_A = [\,|f(\theta)|^2 + |f(\pi-\theta)|^2 + \frac{2}{2S+1} \operatorname{Re} f(\theta) f^*(\pi-\theta)]\,d\Omega$$

2. Фермионы $\quad W_e^F = \frac{S}{2S+1} \quad W_0^F = \frac{S+1}{2S+1}$

полуцелый S

$$d\sigma_F = W_e^F d\sigma_S + W_0^F d\sigma_A = [\,|f(\theta)|^2 + |f(\pi-\theta)|^2 - \frac{2}{2S+1} \operatorname{Re} f(\theta) f^*(\pi-\theta)]\,d\Omega$$

Примеры рассеяния:

$\alpha - \alpha$ (бозоны)

$p - p$ (фермионы)

Чисто кулоновское рассеяние, яд. рассеяние исключим

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

$n = \frac{\alpha}{\hbar v}$, $\quad \alpha = Z_1 Z_2 e^2$

1. $\alpha = 4e^2 \quad n = \frac{4e^2}{\hbar v}$

$(Z_1 = Z_2 = 2e)$

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

m - приведенная масса

$m = \frac{m_\alpha}{2}$

2. $p-p$

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

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

$m = \frac{m_p}{2}$

1. Рассмотрим медленные частицы: $e^2 \gg \hbar v$, $n \gg 1$

$$\frac{d\sigma_{\alpha\alpha}}{d\Omega} =$$ быстроосцил. ч. можно пренебречь, получ. ф-лу класс. мех.

2. Быстрые: $e^2 \ll \hbar v$

$\cos \to 1$ $$\frac{d\sigma_{\alpha\alpha}}{d\Omega} = \left(\frac{8e^2}{mv^2}\right)^2 \cdot \frac{1}{\sin^4\theta}$$

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

14.11.12.

§6. Упругое рассеяние при наличии неупр. процессов

неупр. процесс – часть энергии при столкн. уходит на возбуждение внутр. степеней свободы

$a + A \longrightarrow a + A$ упругое рассеяние (с частицами ничего не произошло, меняются кинематич. хар-ки)

initial final

$\longrightarrow a + A^*$ (у частицы A возбужд. внутр. степ. свободы) неупр. рассеяние

$\longrightarrow b + B$ реакция

$\longrightarrow c + C + D$

$\ldots$

$\longrightarrow z + Z + \ldots$

входной канал – начальный процесс, где сталкив. частицы a и A

выходной канал – конечный процесс

наличие неупр. каналов оказыв. влияние и на упр. рассеяние входной канал один, выходных много

асимптот. в.ф при $r \to \infty$ $\psi(\vec{r}) = \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left[(-1)^{l+1} e^{-ikr} + S_l e^{ikr} \right] P_l(\cos\theta)$

$|S_l| = 1$ нет неупр. каналов (δ_l - действ.) $S_l = e^{2i\delta_l}$

$|S_l| < 1$ - открыт хотя бы один неупр. канал (тут δ_l - станов. комплексным)

$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(S_l - 1) P_l(\cos\theta)$ диф. сечение упр. расс. $\frac{d\sigma_e}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$

$\sigma_e = \int d\Omega |f(\theta)|^2$ интегр. сечение

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

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

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

канал реакции может хар-ся набором кв. чисел $\underbrace{S_{ii}^{(l)}}_{\text{индекс каналов}} \to$ матр. эл-т диагонален по всем каналам (вх. и вых.)

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

$\sigma_{ii} = \sigma_l = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |1 - S_{ii}^{(l)}|^2$, $\psi_f - \psi_i = (S-1)\psi_i$

кон. в.ф. — ψ_f, нач. в.ф. — ψ_i

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

$\sigma_{fi} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |\delta_{fi} - S_{fi}^{(l)}|^2$ - сечение реакции, в кот. входной канал есть i, а вых. f (матр. элемент не диаг. по кв. числам вх. и вых. каналов)

$1 - S_{ii}^{(l)} \Rightarrow \delta_{fi} - S_{fi}^{(l)}$

<u>сечение реакции:</u> $\sigma_r = \sum_{f \neq i} \sigma_{fi}$ (исключая упругое рассеяние)

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

$\hat{S}^{+}\hat{S} = 1$ оператор рассеяния унитарный

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

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

— Сечение реакции выражается ч-з тот же диаг. матр. элемент, что и сечение упр. рассеяния

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

— „вернулись к старым обозначениям"

$$\boxed{\sigma_r \neq 0, \ |S_l| < 1}$$

Любой неупр. процесс всегда сопровождается упр. рассеянием

if $|S_l| = 1$ — отсутствие неупр. процессов

$|S_l| = 0$ — полное поглощение налетающих частиц мишенью

$\underset{\text{total}}{\sigma_t} = \sigma_e + \sigma_r$ — полное сечение всех процессов

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

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

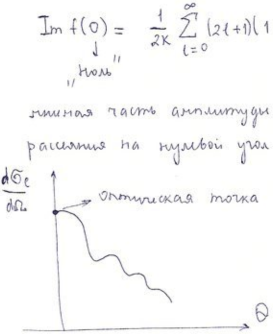
$$\operatorname{Im} f(\underset{\text{„ноль"}}{0}) = \frac{1}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(1 - \mathrm{Re}\, S_l) \Rightarrow \boxed{\frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(0) = \sigma_t}$$

— оптическая теорема

мнимая часть амплитуды рассеяния на нулевой угол

ф-ла Бора-Пайерлса-Плачека

Pierls



экспериментально измерить нельзя, потому что частицу, расс. на нулевой ∠ нельзя отличить от первоначальной

$$\sigma_e = \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)|1 - S_l|^2 \qquad S_0 = e^{2i\delta_0} \qquad \delta_0 \sim k$$

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

для медл-х частиц $k \to 0$

$$S_0 = 1 + 2i\delta_0 = 1 - 2ika$$

if только упр. рассеяние → a - дейст. a - длина рассеяния

if откр. неупр. канал → a · комплексное $\quad a = a_1 + i a_2$

$|S_0| \leq 1$ из св-в унитарности S-матрицы

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

$$\sqrt{\underbrace{(1+2ka_2)^2}_{a_2<0} + 4k^2a_1^2} \leq 1 \qquad a_2 < 0 \qquad \sigma_e = 4\pi|a|^2$$

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

$$= \frac{4\pi}{k}|a_2| \qquad \boxed{\sigma_r = \frac{4\pi}{k}|a_2|}$$

члены линейные по k^2 оставляем только

$\hbar k = p = mv \qquad$ „закон $\frac{1}{v}$"

ГЛАВА 3. Движение в магн. поле

§1. Уравнение Шредингера в магн. поле

$H = \frac{1}{2m}(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})^2 + e\varphi$ - класич. ф-я Гамильтона

p - обобщ. импульс

скал. φ и вект. $\vec{A}$ потенциалы

$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A})^2 + e\varphi \underbrace{- \hat{\vec{\mu}}\vec{H}}$ — чисто квантовая добавка

$\hat{\vec{\mu}} = \mu\frac{\hat{\vec{S}}}{S}$ - оператор магнитного момента

$\mu_z = \mu\frac{\sigma}{S}$ - проекция магн. момента на ось квантования (max значение м.м. на ось кв. $= \mu$ при $\sigma = S$)

магнитный момент $\bar{e}$: $\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m_e c}$ - магнетон Бора

$\mu_B = 0{,}579 \cdot 10^{-8} \frac{эВ}{Гс}$ $\mu_e = -\mu_B$ $\mu_N = \frac{|e|\hbar}{2m_p c}$ - ядерный магнетон

$\mu_N = 0{,}315 \cdot 10^{-11} \frac{эВ}{Гс}$ $\mu_p = 2{,}79 \cdot \mu_N$

$\mu_n = -1{,}91 \mu_N$

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

$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla$ $\vec{A}\hat{\vec{p}} - \hat{\vec{p}}\vec{A} = i\hbar\,\mathrm{div}\vec{A}$ $\vec{A} = \frac{1}{2}\underbrace{[\vec{H},\vec{r}]}_{}$ $\mathrm{div}\vec{A} = 0$

вект. произведение, а не коммутатор

ур-е Шредингера для $\bar{e}$:

$$\left| \; i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\vec{p}} + \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2\psi + (\mu_B\vec{\sigma}\vec{H} - e\varphi)\psi + U\psi \; \right|$$ ур-е Паули

21.11.12.

§2. Движение зар. частицы в однор. магн. поле

1930 год Ландау

выберем вект. потенциал: $A_x = -yH$ $A_y = A_z = 0$ $\vec{H} = \mathrm{rot}\vec{A}$

Ось z выбрана вдоль $\vec{H}$ (магн. поле напр. вдоль z)

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

$$\left.\hat{H} = \frac{1}{2m}\left[\left(\hat{p}_x + \frac{eH}{c}y\right)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right] - \frac{\mu\sigma H}{s}\right\} \psi(\vec{r})$$ поскольку зав-ть от спина станов. не существ.

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

$$\hat{S}_z\psi(\vec{r},\sigma) = \sigma\psi(\vec{r},\sigma)$$

гамильтониан не содерж. явно $x, z \Rightarrow$ операторы $\hat{p}_x, \hat{p}_z$ - коммут. с гамильт.

x, z - компоненты обобщ-го имп-са сохр.

$\psi(\vec{r}) = e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_z z)} \chi(y)$ Нужно найти одну ф-ю $\chi(y) \rightarrow$ все свелось к одномерному движению

z сост. обобщ. имп. совпадает с составл. обычного импульса $p_z = m v_z$
Скорость вдоль оси z может иметь произв. значение - вдоль магн. поля
Энергия не квантуется.

$\hat{p}_y^2 = -\hbar^2 \frac{d^2}{dy^2}$ $\chi''(y) + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E + \frac{\mu\sigma H}{S} - \frac{p_z^2}{2m}\right] - \frac{m}{2}\omega_H^2 (y-y_0)^2]\chi(y) = 0$

$\omega_H = \frac{|e|H}{mc}$ $y_0 = -\frac{c p_x}{eH}$ $\chi''(y) + \frac{2m}{\hbar^2}[\mathcal{E} - \frac{m}{2}\omega_H^2 (y-y_0)^2]\chi(y) = 0$

ур-е гармонич. осциллятора

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

Реш-я д. 8: $\mathcal{E}_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega_H$

$E_n = \underbrace{(n+\frac{1}{2})\hbar\omega_H}{} - \frac{\mu\sigma H}{S} + \frac{p_z^2}{2m}$ эти величины вырождены по p_z с ∞ - кратностью

$\frac{\mu\sigma H}{S} = \frac{\mu S}{S}\frac{\omega_H m c}{e}$

определяет дискр-е ур-ни $\rightarrow$ ур-ни Ландау

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

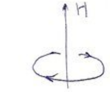
$\mu_e = -\frac{|e|\hbar}{2m_e c}$ - магнетон Бора $E_n = (n + \frac{1}{2} + \sigma)\hbar\omega_H - \frac{p_z^2}{2m}$ -

Энергия е в магн. поле

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

$(n, \sigma = +\frac{1}{2})$
$(n-1, \sigma = -\frac{1}{2})$ дополнит-е вырождение энергии

эти ур-ни совпадают



- в класс. мех. дв-е происх. по окр. с неподв. центром

в кл. мех: $x_0 = \frac{c p_y}{eH} + x$ такая велич. должна сохр.
(опер-р эт велич. коммут. с $\hat{H}$)

x_0 - должно соотв. центру окр-ти

$\hat{x}_0, \hat{y}_0$ - в кв. мех. не коммут. др. с др. (не могут иметь одновр. опред. знач.)

§3. Атом в магн. поле

гамильтониан ат. в м. поле $\hat{H} = \frac{1}{2m}\sum_a [\vec{p}_a + \frac{|e|}{c}\vec{A}_a(\vec{r}_a)]^2 + \underbrace{\frac{|e|\hbar}{mc}}_{\text{тут „2" сократ. с } S=\frac{1}{2}}\vec{H}\hat{\vec{S}} + \underbrace{\hat{U}}_{\text{потенц. энергия поля}}$

$$\left\{ \frac{1}{S}\sum_a \hat{\vec{S}}_a = \frac{1}{\underset{\frac{1}{2}}{S}}\hat{\vec{S}} \right\}$$

Как выбираем вект. потенц.:

$\vec{A}_a(\vec{r}_a) = \frac{1}{2}[\vec{H}, \vec{r}_a]$, $\quad \frac{1}{2m}\sum_a \hat{\vec{p}}_a^2 + \hat{U} = \hat{H}_0$ - величина, не завис. от м.п.

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

$$\hat{\vec{p}}_a\vec{A}_a = \vec{A}_a\vec{p}_a \qquad \sum_a \hat{\vec{p}}_a[\vec{H}, \vec{r}_a] = \sum_a [\vec{H}, \vec{r}_a]\vec{p}_a = \vec{H}\sum_a \underbrace{[\vec{r}_a, \hat{\vec{p}}_a]}_{\hbar\vec{l}_a} = \hbar\vec{H}\sum_a \vec{l}_a =$$

$$= \hbar\vec{H}\vec{L}$$

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

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

$\hat{\vec{\mu}}_a = -\mu_B(\hat{\vec{J}} + \hat{\vec{S}})$ магнитный момент ат. $\hat{\vec{J}} + \hat{\vec{S}}$ не коллинеарен с $\hat{\vec{J}}$ (полным моментом ат.)

магн. поля слабые:

$\mu_B H \ll \Delta E \rightarrow$ эфф. Зеемана. расщепл. энергет-х ур. атома

J, L, S

Можем воспольз. теорией возмущений и возьмем первый член, линейный по $\vec{H}$.

ось z выбир. вдоль поля $\Delta E = \underset{\frac{|e|\hbar}{2mc}}{\underset{\parallel}{\mu_B}} \cdot H(\langle \hat{J}_z \rangle + \langle \hat{S}_z \rangle)$ - энергия расщепления в первом $\approx$ теории возмущений.

$\downarrow$

$\vec{H}(\hat{\vec{J}} + \hat{\vec{S}}) = \vec{H}(\hat{J}_z + \hat{S}_z)$

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

Строго сохр. величиной в задаче явл. $\vec{J}$.

$\langle \hat{\vec{S}} \rangle \Rightarrow c \langle \hat{\vec{J}} \rangle$. Определить const: c - ?

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

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

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

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

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

$$\langle \hat{S}_z \rangle = M_J \frac{[J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)]}{2J(J+1)} \qquad \Delta E = \mu_B H(\langle \hat{J}_z \rangle + \langle \hat{S}_z \rangle)$$

„ф-ла 4-х букв" (Ю.А.)

$\boxed{\Delta E = \mu_B H M_J g}$, где $\boxed{g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \text{ - множитель Ланде}}$

Величина g определяет расщепление для данного уровня, в зав-ти от величин J, L, S

g - множитель Ланде, (гиромагнитное отношение, гиромагн. множитель) или „g - фактор"

Если $S = 0$, $g = 1$ $\rightarrow$ „нормальный эфф. Зеемана"

if $g \neq 1 \Rightarrow$ „аномальный эфф. Зеемана"

Если $L = 0 \Rightarrow J = S \Rightarrow g = 2$

Состояние с M_{J_1} – M_J имеют одинак. эн. (в эл. поле) не снимается вырождение

28. 11. 12.

$$\boxed{\Delta E = \mu_B \cdot g \cdot M_J \cdot H}$$

g - множитель Ланде („g - фактор")

$$\hat{H} = \underbrace{\hat{H}_0}_{\text{не зав. от м.п.}} + \underbrace{\mu_B(\hat{\vec{J}} + \hat{\vec{S}})\vec{H}}_{\text{линейный член по м.п.}} + \underbrace{\frac{e^2}{8mc^2}\sum_a [\vec{H}, \vec{r}_a]^2}_{\text{квадр. член}}$$

$$^4D_{1/2} \qquad J = \frac{1}{2},\ L = 2,\ S = \frac{3}{2} \Rightarrow g = 0$$

$$\boxed{\text{if} \quad S = 0,\ L = 0}$$

надо искать квадратичную поправку

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

$$\langle \sin^2\vartheta \rangle = \frac{\int_0^\pi d\vartheta \cdot \sin\vartheta \underbrace{\sin^2\vartheta}_{= 1-\cos^2\vartheta}}{\int_0^\pi d\vartheta \cdot \sin\vartheta} = \frac{2}{3} \qquad \Delta E = \frac{e^2 H^2}{12mc^2}\sum_a \langle r_a^2 \rangle$$

$$(\hat{H} - E_n)\psi_n = 0 \qquad \hat{H}(\lambda),\ E_n(\lambda),\ \psi_n(\lambda) \qquad \text{параметр } \lambda$$

продифф. по λ: $\int dq\, \psi_n^* (\hat{H} - E_n)\frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda} = \int \psi_n^* \left(\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} - \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda}\right)\psi_n\, dq$

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

$$\tilde{\hat{H}} = \hat{H}^*$$

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

теорема Хеллмана - Фейнман

как пар-р можно рассматр-ть H $\qquad -\mu_z H$

$$\left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda}\right)_{nn} = \frac{\partial E_n}{\partial \lambda} \qquad \langle \hat{\mu}_z \rangle \overset{?}{=} -\frac{\partial(\Delta E)}{\partial H} \qquad \begin{matrix} -\mu_z H \\ \langle \mu_z \rangle = -\mu_B\, g\, M_J \end{matrix}$$

$\langle \hat{\mu}_z \rangle = \chi H$ $\qquad \boxed{\chi = -\frac{e^2}{6mc^2}\sum_a \langle r_a^2 \rangle}$ магнитная восприимчивость → ф-ла Ланжевена (диамагнетик)

диамагнитный атом $\quad S=0,\ L=0$

$J=0,\ L\neq 0,\ S\neq 0$ → в эт. случае, линейный по полю член не даст поправки

вторую поправку к энергии → она отрицательна $\Delta E<0$ (прошлый семестр)

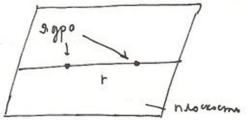
$\langle \hat{\mu}_z \rangle > 0$ – атом парамагнитный

В сильных полях рассмотрим поведение атома.

Эфф. расщепления в сильных м.п. – эфф Пашена-Бака

ГЛАВА 4 Двухатомная молекула

§1. Электронные термы двухат. молекулы



такая молекула обладает аксиальной симметрией

поле будет аксиально-симметричном

полн. орбит. момент молек. сохр. не будет (сохр. только в центр-сим. поле)

Будет сохр. проекция орб. момента молекулы Λ (лямбда большое)

для атома $L = 0 \quad 1 \quad 2 \ \ldots$
$\qquad\qquad\quad S \quad P \quad D \ \ldots$

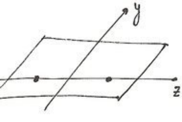
для молекулы $\Lambda = 0 \quad 1 \quad 2$
$\qquad\qquad\qquad \Sigma \quad \Pi \quad \Delta$ большие греческие буквы
$\qquad\qquad\qquad$ сигма пи дельта

Скорости $\bar{e}$ велики по ср. с движ. ядер

$U(r)$ - энергия электронного терма r - расст. между ядрами (в хорошем первом $\approx$)

$S \neq 0$ $2S+1$ - кратное вырождение   мультиплетность терма

$^3\Pi$ Отражение относ-но плоскости, в кот. лежит ось симметрии молекулы



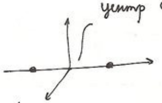
$$x \to -x \qquad p_x \to -p_x$$
$$y \to y \qquad p_y \to p_y$$
$$z \to z \qquad p_z \to p_z$$

$\hbar \hat{l}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x \to -\hbar \hat{l}_z$ z- составл-я момента импульса меняет знак при отражении от плоскости

$\Lambda \to -\Lambda$

все состояния, в кот-х $\Lambda \neq 0$, двукратно вырождены

Σ - терм не вырожден $\psi \to c\psi$ $c^2 = 1$
$(\Lambda = 0)$ $\psi \to c^2\psi$ $c = \pm 1$



Σ^+ - знак не меняется (в. ф.)
Σ^- - знак меняется (у волн. ф-ции)

if молек. состоит из двух одинак-х атомов: возникает центр симметрии на ср. расст. между ядрами

$\hat{H}$. будет инвар-н относ-но одновре. измен. всех коорд-т $\bar{e}$-ов

сост. могут быть четными / нечетными

gerade - четный $^3\Pi_g$
ungerade - нечетный $^3\Pi_u$

спин = 0 в большинстве двухат. молекул, терм: $^1\Sigma^+$

$^1\Sigma_g^+$ - двухат. молекула, сост. из одинак. молекул (осн. состояние)

Исключения: O_2 $\quad ^3\Sigma_g^-$, $\quad NO$ $\quad ^2\Pi$

§2. Валентность

H_2 атом водорода, осн. сост. ^2S

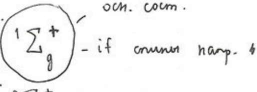
осн. сост.

Коорд. ч. симметр. $^1\Sigma_g^+$ - if спины напр. в разн. стороны (атомов) ($S = 0$) спинор антисимметр.

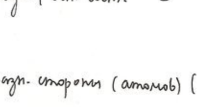
Коорд. ч. антисим. $^3\Sigma_u^+$ - if спин напр. в одну стор. ($S = 1$) спинор симметричн

$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$ ядра - протоны, фермионы - не могут наход. в одном и том же состоянии

if в.ф. обращ. в ноль в точке ⇒ узел ⇒ по осцилляц. теореме - возб. сост.

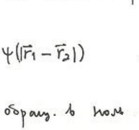


H_2O - имеет „форму бумеранга"



(ат. водорода нах. далеко др. от друга, они не взаимод - бумеранг, if бы H взаимод-ли др. с другом - „форма треугольника")

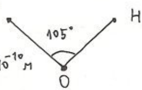
SO_2



пример:

O_2

O_3



бумеранг

понятие „валентности не применимо"

CO_2

мн. молекула

H_2

водород одновалентен

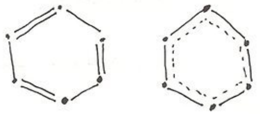
1927г. Гайтлер
Лондон
(валентность с точки зрения кв. мех.)

способность атомов соед. др. с др. зависит от спина

валентность водорода - есть удвоенный спин атома

для двухат. молек: валентность = удвоенный спин

Бензол C_6H_6



(в старых книгах по химии)

"полуторная валентность"

нет строгого понятия валентности

05.12.12.

Валентность эл-в главных групп.

группа № 1: щелочные Met

Li, Na, K, Rb, Cs, Fr спин = $\frac{1}{2}$ (1 валентный $\bar{e}$)

валентность - удвоенный спин ⇒ $\boxed{\text{валентность} = 1}$ Li_2O - соед. в осн. сост.

1-ое возб. сост. лежит высоко по отнош. к осн. сост.

гр. № 2: щелочно-земельные Met

Be, Mg, Ca, Sr, Ba, Ra $\boxed{\text{спин} = 0}$

BeO вступают в соед-е

CaO

очень близко к осн. сост. расположено 1-ое возб. состояние

$1S^2 2S^2$ - осн. сост.

sp - в возб. сост. вступают в соед.

сум. спин = 1 (два $\bar{e}$ в разных оболочках)

$\boxed{\text{валентность} = 2}$

гр. № 3: B, Al, Ga, In, Tl $S = \frac{1}{2}$ (спин атома)

s^2p $S = \frac{1}{2}$

sp^2 $S = \frac{3}{2}$ → $\boxed{\text{валентность} = 3}$ (в возб. сост. ат.)

B, Al во всех соед-х трехвалентны; Остальные элементы имеют

вал. 3 или 1. TlCl и $TlCl_3$

4 гр.: C, Si, Ge, Sn, Pb

s^2p^2 $S = 1$ $\boxed{\text{валентность в осн. состоянии} = 2}$

sp^3 $S = 2$ $\boxed{\text{валентность} = 4}$

склонность к проявлению низшей валентности возр. с увелич. ат. номера

C, Si – валентн. 4 Исключение: CO

CO_2, SiO_2

5 группа: N, P, As, Sb, B

s^2p^3 - в осн. сост. $S = \frac{3}{2}$ $\boxed{\text{валентность} = 3}$ в осн. сост.

sp^3s^1 $S = \frac{5}{2}$ $\boxed{\text{валентность} = 5}$ в возб.

$\overset{III}{N}H_3$, $H\overset{IV}{N}O_3$

6 группа: O, S, Se, Te, Po

кислород во всех соед-х проявл. самую низкую вал = 2

s^2p^4 $S = 1$ $\boxed{\text{валентность} = 2}$ в осн. сост.

$s^2p^3s^1$ $S = 2$ $\boxed{\text{вал.} = 4}$

$sp^3s^1p^1$ $S = \frac{6}{2}$ $\boxed{\text{вал.} = 6}$

$H_2\overset{II}{S}$, $\overset{IV}{S}O_2$, $\overset{VI}{S}O_3$

7 группа: галлоиды F, H, B, I, At

s^2p^5 $S = \frac{1}{2}$ $\boxed{\text{вал.} = 1}$

$s^2p^4s^1$ $S = \frac{3}{2}$ $\boxed{\text{вал.} = 3}$

$s^2p^3s^1p^1$ $S = \frac{5}{2}$ $\boxed{\text{вал.} = 5}$

$sp^3s^1p^{12}$ $S = \frac{7}{2}$ $\boxed{\text{вал.} = 7}$

фтор F всегда одновалентен

$H\overset{I}{Cl}$, $H\overset{III}{Cl}O_2$, $H\overset{IV}{Cl}O_3$, $H\overset{VII}{Cl}O_4$

8 группа: благородные газы: Ne, Ar, Kr, Xe, Rn

1962г. Бартлед $XePtF_6$ открыл соединение ксенона.

все ур-ни заполнены, считалось что б.г. соед. не образ. Но ē переходит в близлежащие f и d оболочки

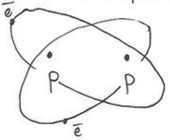
Молекулы образуют <u>гетерополярную</u> или <u>ионную</u> связь

NaCl - поваренная соль

$Na^+ + Cl^-$ ē перескакивают от Na к Cl. Образуются две электр. зар. частицы

(Na^+) — (Cl^-) два иона у молек. большой дип. момент

<u>гомеополярная связь (ковалентная)</u> : H_2, O_2, N_2



обобществить ē

от. малые дип. моменты

<u>Элементы промежуточных групп</u>: начинают заполняться <u>d</u> и <u>f</u> оболочки (они нах. глубоко в ат.)

получ. соединения, в которых не насыщены все возм. связи; молек. со спинами ≠ 0.

валентность может меняться на 1.

Элементы группы железа : $\overset{II}{Fe}O$ $\overset{III}{Fe_2}O_3$ образуют <u>комплексы</u>

образуют комплексные соединения

$KMnO_4$ $(MnO_4)^-$ - одновалентный комплекс

$Fe(CN)_6$ ----

$K_4Fe(CN)_6$

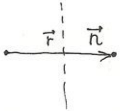
$\boxed{Cu, Ag, Au}$ Cu: $3d \xrightarrow{1\bar{e}} 4p$ медь - элемент группы железа

Ag - эл-т группы палладия

Au - эл-т группы платин.

§ Колебательная и вращательная структуры синглетных термов 2-х атомных молекул

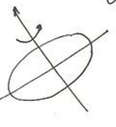
Синглетный терм $S = 0$



может вращаться относ-но оси $\perp$ оси симметрии

с точки зр. кв. мех. квантовая система не может вращ. относ. оси симметрии (все сост-я неразличимы), а может вращ. относ. оси $\perp$ к оси симметрии.

$U(r)$



$\hat{\vec{K}}$ - полный момент молек. (состоит из орбит. мом. всех $\bar{e}$ и момента вращения)

полный орбит. момент всех $\bar{e}$ $\hat{\vec{L}}$

$B(r)\left(\hat{\vec{K}} - \hat{\vec{L}}\right)^2 \to$ момент вращения

if взять твердотельную модель молекулы $B(r) = \dfrac{\hbar^2}{2\mu r^2}$ энергия вращения

$\mu = \dfrac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2}$ - приведенная масса

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

кв. число K — электронная эн. — усреднение по электронному состоянию молекулы

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

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

$\langle\hat{\vec{L}}^2\rangle = \Lambda^2$ зав. только от электронного сост. молекулы (от кв. числа Λ)

$$\langle\hat{\vec{K}}\hat{\vec{L}}\rangle = \langle\hat{K}_x\hat{L}_x\rangle + \langle\hat{K}_y\hat{L}_y\rangle + \langle\hat{K}_z\hat{L}_z\rangle =$$

каждый оператор должен усредняться независимо

$$= \langle\hat{K}_x\rangle\underbrace{\langle\hat{L}_x\rangle}_{=0} + \langle\hat{K}_y\rangle\underbrace{\langle\hat{L}_y\rangle}_{=0} + \langle\hat{K}_z\rangle\underbrace{\langle\hat{L}_z\rangle}_{=\Lambda} =$$

$= \langle\hat{K}_z\rangle\Lambda$ $\qquad (\hat{\vec{K}} - \hat{\vec{L}})\cdot\vec{n} = 0$ $\qquad \vec{n}$ - ед. вектор вдоль оси симметрии

$\hat{\vec{K}}\vec{n} = \hat{\vec{L}}\vec{n}$

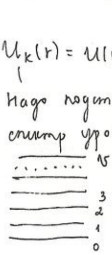
$\langle \hat{\vec{K}}\vec{n}\rangle = \langle \hat{\vec{L}}\vec{n}\rangle$

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

малая поправка к электр. энергии

$U_K(r) = U(r) + B(r)K(K+1), \quad \langle \hat{K}_z\rangle = \Lambda \qquad K \geq \Lambda$

Надо подставить эту энергию в ур-е Шредингера и решать. Получим спектр уровней → будем их нумеровать $v = 0, 1, 2, ..$



В общем случае, решить нельзя. Но можно для малых кв. чисел

Разложим энергию в ряд по величине $\xi = r - r_e$

$U(r)$ имеет min при $r = r_e \qquad U_e = U(r_e)$

$U(r) = U_e + \frac{\mu\omega_e^2}{2}\xi^2$ (минимум, 1-ая произв. = 0)
вторая произв. > 0 $\quad \omega_e$ - частота колебаний

$B(r) = B_e + \dots \qquad B_e = B(r_e)$ оставляем только 1-й член

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

Задача сводится к задаче о кв. гармон. осцил.

$B_e = \frac{\hbar^2}{2\mu r_e^2} = \frac{\hbar^2}{2I_e}$, $I_e = \mu r_e^2$ - момент инерции молекулы в твердотельн. модели

$E = U_e + B_e K(K+1) + \hbar\omega_e(v+\frac{1}{2}) \qquad E = E_{el} + E_r + E_v$

электр. энергия; вращат. эн.; колебат. эн.

$\left.\begin{aligned} E_{el} &= E_e \\ E_r &= B_e K(K+1) \\ E_v &= \hbar\omega_e(v+\frac{1}{2}) \end{aligned}\right\}$ $\quad \frac{m_{яд}}{m_e} \gg 1, \quad \frac{m_e}{m_{яд}} \ll 1$

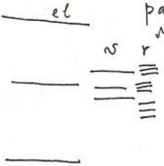
оценим энергии по этому пар-ру

E_{el} - от $m_{яд}$. не зависит

$B_e \sim \frac{1}{\mu} \qquad \omega_e = \frac{1}{\sqrt{\mu}} \qquad \omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$ - осциллятор

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

расщепление ур-й молекулы



12.12.12

Мультиплетные термы

спин мол. отличен от нуля

if не учитывать спин – не учитыв. релятив. эфф. – взаимодействие „спин - ось"

вырождение по спину $S(S+1)$

Осн. вклад в релятив. эфф. вносит спинорбитальное взаимод-е

случай а: взаимод-е спин-ось велико по сравн. с расст. между вращат. уровнями

$$E_{\text{спин-ось}} \gg \Delta E_r \qquad \cancel{K}$$

случай б: $E_{\text{спин-ось}} \ll \Delta E_r \qquad \cancel{\Sigma}, \cancel{\Omega}$

Σ - проекц. спина на ось симметрии молекулы

$\Sigma = S, S-1, \ldots, -S$ направление проекции спина Σ совпад. с напр. проекции орбит. мом. $\Lambda \Rightarrow \Sigma > 0$

$\Lambda + \Sigma = \Omega$ проекция полного момента на ось симметрии мол.

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

обозначение: ${}^2\Pi_{\frac{1}{2}}$ $\Omega = \frac{1}{2}$

Электр. терм атома расщепл. на $2S+1$ терма

учет движения ядра – возникнов. колебат. и вращат. структуры

случай а) → квантового числа K не существует. Есть

полный момент молекулы $J = |\Omega|, |\Omega|+1$

$\hat{L}\hat{S}$ надо усреднить по электронным термам не возмущенным

$$\underbrace{U(r)}_{\text{энергия невозмущ. эл. терма}} + \underbrace{A(r)}\Sigma + A(r)\Lambda - \widehat{A(r)\Lambda} \Rightarrow U(r) + A(r)\Omega$$

вся зав-ть от Λ тут сидит

удобное выражение для спинорбит-го взаимодействия

$U(r) + A(r)\Omega$ изменим знак времени $t \to -t$

все моменты и проекц. моментов меняют знак $\vec{M} = [\vec{r}, \vec{p}]$

Ω и Σ поменяют знак

поменяет знак $\Leftarrow$ меняет знак

для Σ - термов $\Lambda = 0$

$U(r)$ и $A(r)$ - зависят только от Λ - они НЕ поменяют знак

а энергия не может измениться $\Rightarrow$

$\Rightarrow$ $\boxed{A(r) = 0 \text{ для } \Sigma\text{-термов}}$

обычно для Σ-термов имеет место случай б.

Усреднение учитываем вращение как возмущение

момент вращения $(\hat{\vec{J}} - \hat{\vec{L}} - \hat{\vec{S}})^2 \cdot B(r)$ - оператор центробежной эн.

усреднить эту величину по электр. терму

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

усреднение по невозмущ. электр. сост. молекулы

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

$$\left. + 2\langle \hat{\vec{L}}\hat{\vec{S}} \rangle + \langle \hat{\vec{S}}^2 \rangle \right]$$

не зависит от спина

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

$(\hat{\vec{J}} - \hat{\vec{L}} - \hat{\vec{S}}) \cdot \vec{n} = 0$ $\quad \hat{\vec{J}}\vec{n} = (\hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}})\vec{n}$ $\quad \langle \hat{\vec{L}}\vec{n} \rangle = \Lambda$

вдоль оси симметрии $\quad \langle \hat{\vec{S}}\vec{n} \rangle = \Sigma$

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

$\langle \hat{\vec{J}}(\hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}) \rangle = \langle \hat{\vec{J}} \rangle \langle (\hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}) \rangle = \Omega^2$ (выживает только z - составляющая)

операторы усредняются независимо

$\langle \hat{\vec{L}}\hat{\vec{S}} \rangle = \langle \hat{\vec{L}} \rangle \langle \hat{\vec{S}} \rangle = \Lambda \cdot \Sigma \to \Lambda \cdot \Omega$

выживает только z-составл.

$$U_J(r) = U(r) + A(r)\Omega + B(r)[J(J+1) - 2\Omega^2] \qquad \xi = r - r_e$$

$U(r) = U_e + \frac{1}{2}\mu\omega_e^2\xi^2 \qquad U_e = U(r_e)$ перв. произв. $=0$
втор. >0

$A(r) = A_e \equiv A(r_e)$
$B(r) = B_e \equiv B(r_e)$ } остальные поправки малы, берем только первые члены

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

$$E = U_e + A_e\Omega + B_e[J(J+1) - 2\Omega^2] + \hbar\omega_e(v + \tfrac{1}{2})$$

вибрационное кв. число связано с колеб. ядер.

нет кв. числа K

"другой билет"

случай б

$E_{\text{спин-ось}} \ll \Delta E_r \qquad K$ — существует

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

$|K - S| \leq J \leq K + S$ кв. числа Σ и Ω не сущ-т

усреднить по эл. сост. и по вращению

$V_{\text{сп-ос}} = A(r)\,\hat{\vec{S}}\vec{n}$ — оператор энергии (только проекции на ось молек. $\vec{n}$)

$\vec{K}$ — единств. направление (в отсутств. спина)

под знаком усреднения $\vec{n} \to c\hat{\vec{K}}$ $\qquad (\hat{\vec{K}} - \hat{\vec{L}})\vec{n} = 0$,

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

$\langle \vec{n}\hat{\vec{K}} \rangle = c\langle \hat{\vec{K}}^2 \rangle = cK(K+1) \qquad \boxed{c = \dfrac{\Lambda}{K(K+1)}}$

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

$$\Rightarrow V_{\text{сп-ос}}(r) = A(r)\cdot\frac{\Lambda}{K(K+1)}\cdot\frac{1}{2}[J(J+1) - K(K+1) - S(S+1)]$$

$$V_{\text{сп-ось}}(r) = A(r)\cdot\frac{\Lambda}{2K(K+1)}(J-S)(J+S+1) - \underbrace{\tfrac{1}{2}A(r)\Lambda}_{}$$

не зависит от K, J

$$U_K(r) = U(r) + B(r)K(K+1) + A(r)\frac{\Lambda}{2K(K+1)}(J-S)(J+S+1)$$

потенц. эн.

подставим в ур. Шр. → можно решать только численно

...

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

$$\boxed{\begin{aligned} &U(r) \to U_e + \tfrac{1}{2}\mu\omega_e^2\xi^2 \\ &B(r) \to B_e \\ &A(r) \to A_e \end{aligned}}$$

разложим в ряд

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

<u>случай c</u>: взаимод. орб. момент - ось мало по ср. с взаимод. спин-орбита

Обычно проявл. if в атоме есть f-электроны (некомпенсир. спины)

их взаимод. с осью мол. ослаблено

<u>случай d</u>: для высоколежащих уровней с большими вращат. эн. у легких молекул (больш. J, S)

H_2, He_2 большие энергии вращательные (малый момент инерции)

19.12.12

§ 5 Силы Ван-дер-Ваальса

это силы с которыми взаимод-т атомы на больших расст.-х
атомы электрич. нейтральны
мультипольные моменты атомов обуславл. это взаимод-е
дип. момент не даст поправку в первом ≈, даст по втором ≈.

R - расст.-е между атомами

Энергия взаимод. двух дип. моментов:

$$U(R) = \frac{\vec{d}^{(1)} \cdot \vec{d}^{(2)} - 3(\vec{d}^{(1)}\vec{n})(\vec{d}^{(2)}\cdot\vec{n})}{R^3}$$

$\vec{n}$ - ед. вектор вдоль напр-е, соед. атомы

$$\vec{n} = \frac{\vec{R}}{R}$$

$$U(R) = \frac{\vec{d}^{(1)} \cdot \vec{d}^{(2)} - 3 d_z^{(1)} d_z^{(2)}}{R^3}$$

$$\Delta E(R) = \sum_{i,j \neq 0} \frac{|\langle \psi_i^{(1)} \psi_j^{(2)} | \hat{U}(R) | \psi_0^{(1)} \psi_0^{(2)} \rangle|^2}{E_0^{(1)} + E_0^{(2)} - E_i^{(1)} - E_j^{(2)}}$$

i, j - конечные состояния атомов

по теор. возмущений 2-ая поправка к энергии

$$\hat{H}_1 \psi_0^{(1)} = E_0^{(1)} \psi_0^{(1)} \qquad \hat{H}_2 \psi_0^{(2)} = E_0^{(2)} \psi_0^{(2)}$$

$$\hat{H}_1 \psi_i^{(1)} = E_i^{(1)} \psi_i^{(1)} \qquad \hat{H}_2 \psi_j^{(2)} = E_j^{(2)} \psi_j^{(2)}$$

Каким образом зависит поправка к энергии от R?
(нас интересует)

$$\Delta E(R) = -\frac{C}{R^6} < 0, \quad C > 0 \qquad F(R) = -\frac{\partial(\Delta E)}{\partial R} = -\frac{6C}{R^7}$$

поправка к энергии

сила

силы притяжения

оба атома нах. в S-состоянии

if в S-сост. нах. один атом, а другой - в др. состоянии ⇒
получим то же самое (дип. мом. 1-го ат. будет обращ. в 0)

if полн. момент атома $\neq 0$ (вращат. момент)

Ср. знач. дип. мом. $= 0$, а квадруп. момента ср. знач. может $\neq 0$

$L \neq 0$, $\underbrace{J = 0}$

$\Delta E = \frac{C'}{R^5}$ квадр. мом. C' может быть > 0, или < 0

есть два одинак. атома, кот. нах. в разных состояниях

симметрия

дополнительное вырождение - первая поправка $\neq 0$ $\quad \Delta E = \frac{\tilde{C}}{R^3}$

$\tilde{C} \gtrless 0$

в реалистических ситуациях (газ атомов) усредняется по полным моментам, все мин. матр. элементы зануляются, ост. квадр. члены по дип. моменту.

(*) §6. Ур-е Липпмана - Швингер

$$\begin{cases} (E - \hat{H}_0)\psi(\vec{r}) = U(\vec{r})\psi(\vec{r}) & \text{в задачах рассеяния надо дополнить} \\ \text{гран. условием } r \to \infty & \psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} + f(\vec{k}, \vec{k}')\frac{e^{ikr}}{r} \end{cases}$$

Их можно легко объединить в одно интегр. ур-е

волн. вектор налетающей частицы

в. в-р рассеянной частицы

$\psi^{(+)}(\vec{r})$ - реш-е

$$\psi^{(+)}(\vec{r}) = \underset{\text{реш-е однор. ур-я}}{e^{i\vec{k}\vec{r}}} + \underset{\text{частное реш-е неодн. ур.}}{\frac{1}{E - \hat{H}_0 + i0}} U(\vec{r})\psi^{(+)}(\vec{r})$$ - формальное реш-е

$$U(\vec{r})\psi^{(+)}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3\varkappa\, e^{i\vec{\varkappa}(\vec{r} - \vec{r}')} \int d^3r' U(\vec{r}')\psi^{(+)}(\vec{r}')$$

разложим $U(\vec{r})\psi^{(+)}(\vec{r})$ по собств. функциям оператора $\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$ (т.е. по собств. ф. $\Delta \to$ плоские волны)

$$\psi^{(+)}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} - \int d^3\vec{r}' U(\vec{r}')\psi^{(+)}(\vec{r}') \underbrace{\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3\varkappa \frac{e^{i\vec{\varkappa}(\vec{r} - \vec{r}')}}{E - E' + i0}}_{G^{(+)}(\vec{r} - \vec{r}') \text{ ф-я Грина}}$$

$E' = \frac{\hbar^2\varkappa^2}{2m}$

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

ур-е Липпмана-Швингера

$|\vec r - \vec r'| \approx r\left(1 - \frac{\vec r\vec r'}{r^2} + \ldots\right)$ $\qquad \psi^{(+)}(\vec r) = e^{i\vec k\vec r} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{ikr}}{r}\int d^3r'\, U(\vec r')\, e^{-i\vec k\vec r'}\psi^{(+)}(\vec r')$

$r \to \infty$ $\qquad\qquad r \to \infty$

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

коэф. при сферически расход. волне

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

первое борновское $\approx$

$$= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\langle \vec k' | U(\vec r) | \vec k \rangle$$

$\psi^{(+)}(\vec r) = e^{i\vec k\vec r} + \hat G\, \hat U\, \psi^{(+)}(\vec r) \to$ символическая запись ур. Липпмана-Шв.

$$\hat G = \frac{1}{E - \hat H_0 + i0}$$

можно решать методом итерации

$8, 9 - 15^{\underline{00}}$ 403 ауд. консультации

2 вопроса + 1 задача

Глава 1. Атом. Ст 1

Глава 2. Упругое и неупругое рассеяние. Ст 20

Глава 3. Движение в магнитном поле. Ст 39

Глава 4. Двухатомная молекула. Ст 45