Принцип суперпозиции.

q - совокупн. коорд кв сист., конфигур. пространство

$$q = \{ q_1, q_2 \dots q_n, \dots \}$$

$$dq = \prod_{i=1}^{n} dq_i$$ - элемент конфиг. прост

Состояние описывается в-ф-цией $\psi(q, t)$

$dw = |\psi(q)|^2 dq$ - вероятн того, что проведенное над сист измерение даст знач между q и $q+dq$.

Стационарное состояние $\psi(q)$

Условие нормировки $\int dq\, |\psi(q)|^2 = 1$.

Принцип суперпозиции: если кв. система может нах-ся в состоянии, описываемом в. ф-цией $\psi_1(q)$ и некоторые измерения над ней приводят к рез-ту 1, а в сост опис $\psi_2(q) \to$ к 2, то кв. сист. может нах-ся в сост описыв

$$\psi(q) = a_1 \psi_1(q) + a_2 \psi_2(q)$$ → либо 1 либо 2.

где a_1, a_2 - компл. константы → вероятность

$|a_1|^2 \to 1 \qquad |a_2|^2 \to 2$.

⇒ все ур-я кв. мех должны быть линейными.

$$dw = |\psi(q)|^2 dq = \{ |a_1|^2 |\psi_1|^2 + |a_2|^2 |\psi_2|^2 +$$

$$+ \underbrace{a_1 a_2^* \psi_1 \psi_2^* + a_1^* \psi_1^* a_2 \psi_2}_{\text{интерференционные члены}} \} dq$$

$$\psi(q) = \sum_n a_n \psi_n(q)$$

$$\int dq\, |\psi(q)|^2 = \int dq \{ |a_1|^2 |\psi_1|^2 + |a_2|^2 |\psi_2|^2 \} =$$

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

$$\Rightarrow \sum_{i=1}^{n} |a_i|^2 = 1$$

Если нет, или слабовзаимодействующие части,

то $\psi_{12}(q_1, q_2) = \psi_1(q_1)\, \psi_2(q_2)$

Операторы.

Обозначим некоторую физ. величину f характ. свойства нашей кв. системы и она может принимать ряд собств значений

$f_1, f_2 \dots \to f_n$, $n = 1, 2, 3 \dots$

Совокупность этих значений → спектр собств значений ↗ дискретный ↘ непрерывный

Обозначим $\psi_n(q)$ → собств в. ф. физ. велич. f_n

$\psi(q) = \sum_n a_n \psi_n(q)$

$\sum_n |a_n|^2 = 1.$

Умножим на $\psi_m^*(q)$ и проинтегрируем.

$$\int dq\, \psi_m^*(q)\psi(q) = \sum_n a_n \int dq\, \psi_m^*(q)\psi_n(q) =$$

$$= \sum_n a_n \delta_{nm} = a_m$$

т.к полная ортонорм система, т.е

$$\int \psi_m^* \psi_n \, dq = \delta_{nm}$$

$$\Rightarrow a_m = \int dq\, \psi_m^*(q)\psi(q)$$

Среднее значение физ. величины $\langle f \rangle$

$$\langle f \rangle = \sum_n f_n |a_n|^2$$

f сопоставим оператор $\hat{f}$ — линейный

$$\langle f \rangle = \int dq\, \psi^*(q)\, \hat{f}\, \psi(q)$$

$$\langle f \rangle = \sum f_n |a_n|^2 = \sum_n f_n\, a_n^*\, a_n =$$

$$= \int dq\, \psi(q) \sum f_n\, a_n^*\, \psi_n^*(q) =$$

$$= \{ a_n^* = \int dq\, \psi_n(q) \psi^*(q) \} =$$

$$= \int dq\, \psi^*(q) \left[\sum_n f_n\, a_n\, \psi_n(q) \right]$$

$$\Rightarrow \hat{f}\psi(q) = \sum_n a_n f_n \psi_n(q)$$

$$\psi(q) = \sum_n a_n \psi_n(q)$$

$$\sum_n a_n \hat{f} \psi_n(q) = \sum_n a_n f_n \psi_n(q)$$

$$\Rightarrow \hat{f}\psi_n(q) = f_n \psi_n(q)$$

Собств. значение физ. величины должно быть действительным $f_n^* = f_n \Rightarrow \langle f \rangle^* = \langle f \rangle$

Введём транспонирование

$$\int dq\, \psi_1(q)\, \hat{f}\, \psi_2(q) = \int dq\, \psi_2(q)\, \tilde{\hat{f}}\, \psi_1(q)$$

$$\int dq\, \psi^*(q)\, \hat{f}\, \psi(q) = \int dq\, \psi(q)\, \tilde{\hat{f}}\, \psi^*(q) =$$

$$= \left[\int dq\, \psi^*(q)\, \tilde{\hat{f}}^*\, \psi(q) \right]^*$$

$$\Rightarrow \hat{f} = \tilde{\hat{f}}^* = \hat{f}^+ \rightarrow \text{эрмитов}$$

Докажем ортогональность собств. ф-ций эрмит. оператора

$f_n,\ f_m,\qquad f_n = f_m$

$$\left.\begin{array}{l} \hat{f}\psi_n = f_n\psi_n \\ (\hat{f}\psi_m = f_m\psi_m)^* \end{array}\right| \begin{array}{l} \times\psi_m^* \\ \times\psi_n^* \end{array} \qquad - \text{ и } \int$$

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

$$= (f_n - f_m)\int dq\,\psi_m^*\psi_n = 0$$

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

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

$\Rightarrow$ т.к. $f_n \neq f_m \Rightarrow \int dq\,\psi_m^*\psi_n = 0$

собств. ф-ции

$\to$ ортогональны

Алгебра операторов

Для измерения физ. величин со сколь угодной точностью операторы должны коммутировать

$$\hat f \hat g \psi_n(q) = \hat f (\hat g \psi_n(q) = g_n \hat f \psi_n(q) =$$

$$= g_n f_n \psi_n(q)$$

$$\hat g \hat f \psi_n(q) = f_n g_n \psi_n(q)$$

$$\hat f \hat g - \hat g \hat f = [\hat f . \hat g].$$

Возв в степень $\Rightarrow$ $\hat f^m \psi_n(q) = f_n^m \psi_n(q)$

$$F(\hat f)\psi_n = F(f_n)\psi_n$$

Если физ. величины нельзя одновременно измерить со сколь угодной точностью:

$$\int dq\, \psi \underline{\hat f \hat g} \Phi = \int dq\, \psi \hat f (\hat g \Phi) \overset{T}{=} \int dq (\hat g \Phi)(\tilde{\hat f} \psi) =$$

$$= \int dq\, (\tilde{\hat f} \psi)(\hat g \Phi) \overset{T}{=} \int dq\, \Phi \underline{\tilde{\hat g} \tilde{\hat f}} \psi$$

$$\Rightarrow \widetilde{\hat f \hat g} = \tilde{\hat g} \tilde{\hat f} \quad \Rightarrow \quad (\hat f \hat g)^+ = \hat g \hat f$$

Непрерывный спектр.

$$\psi(q) = \int df\, a_f \psi_f(q) \qquad f: \psi_f(q)$$

(В отличие от дискретного:

$$\psi(q) = \cancel{\int df\, a_f \psi_f}\; \sum_n a_n \psi_n(q) \qquad f: f_n$$

→ домножим на $\psi_{f'}^*(q)$ и проинт.:

$$\int dq\, \psi_{f'}^*(q) \psi(q) = \int df\, a_f \left[\int dq\, \psi_{f'}^*(q) \psi_f(q)\right]$$

$$\Rightarrow a_f = \int dq\, \psi_f^*(q) \psi(q)$$

$$\Rightarrow \int dq\, \psi_{f'}^*(q)\, \psi_f(q) = \delta(f'-f)$$

$$\int dq \int df\, df'\, a_f^* a_{f'} \psi_f^*(q) \psi_{f'}(q) = \int df\, |a_f|^2 = 1.$$

В $\psi(q) = \int df\, a_f \psi_f(q)$ подставим

$$a_f = \int dq'\, \psi_f^*(q') \psi(q')$$

$$\psi(q) = \int dq'\, \psi(q') \left[\int df\, \psi_f^*(q') \psi_f(q)\right]$$

$$[\ldots] = \int df\, \psi_f^*(q')\, \psi_f(q) = \delta(q'-q)$$

→ условие полноты

$\psi_f(q)$ — q: индекс представления; f: индекс состояния

$$\psi(q) = {\sum_n}' a_n \psi_n(q) + \int df\, a_f \psi_f(q)$$

Предельный переход к классической механике

Воспользуемся переходом от волн оптики

к геом. $u = a e^{i\varphi}$ — фаза
— амплитуда.

геом. оптика -> при $\lambda \to 0$, т.е

при φ быстро меняющейся на малых расст.

Предположим аналогичное определение в.ф.

$$\psi = a e^{i\varphi}$$

$\varphi \sim S$ фаза должна быть пропорционально действ,

но т.к S - размерна, то разделим на

конст. с размерн S => $\hbar$

$$\Rightarrow \psi = a e^{\frac{iS}{\hbar}} \to$$ квазиклассическа волновая ф-ия

Аналогично геом. оптике фаза должна

быть большой => $\hbar \to 0$.

Оператор Гамильтона

В. ф-ия определяет состояние физ системы в некий момент времени t (+послед и прод)

$\psi(q,t)$

Волновое ур-е Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(q,t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(q,t)$$

$$\Rightarrow \quad \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\psi \ ; \quad \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\hat{H}^*\psi^*$$

$$\frac{d}{dt}\int dq\,|\psi(q,t)|^2 = 0 = \int dq\,\psi^*(q,t)\psi(q,t) =$$

$$= \int dq\left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t}\psi + \psi^*\frac{\partial \psi}{\partial t}\right) = \frac{i}{\hbar}\int dq\,(\psi\hat{H}^*\psi^* -$$

$$- \psi^*\hat{H}\psi) = \frac{i}{\hbar}\int dq\,\psi^*(\hat{H}^+ - \hat{H})\psi = 0$$

тогда $\hat{H}^+ = \hat{H}$ → эрмитов оператор

→ соотв какой-то физ велич.

возьмем $\psi = a e^{\frac{i}{\hbar}S}$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial t}\psi \Rightarrow -\frac{\partial S}{\partial t}\psi = \hat{H}\psi.$$

$$\text{т.е. } \underbrace{\hat{H} = -\frac{\partial S}{\partial t}}$$

Дифференцирование операторов по времени

В матанализе $\dot{f}(t) = \frac{df(t)}{dt} = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{f(t+\Delta t) - f(t)}{\Delta t}$

$f \to \hat{f}$

$\dot{f}$ – ? => Определим как $\langle \dot{f} \rangle = \frac{d}{dt} \langle f \rangle$

$$\langle \dot{f} \rangle = \frac{d}{dt} \langle f \rangle = \frac{d}{dt} \int dq\, \psi^* \hat{f} \psi =$$

$$= \int dq \left\{ \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{f} \psi + \psi^* \hat{f} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right\} =$$

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

$$= \left\{ \int dq (\hat{H}^* \psi^*)(\hat{f} \psi) = \int dq (\hat{f}\psi) \hat{H}^* \psi^* = \right.$$

$$\left. = \int dq\, \psi^* \hat{H}^+ \hat{f} \psi = \int dq\, \psi^* \hat{H} \hat{f} \psi \right\} =$$

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

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

$$\Rightarrow \dot{\hat{f}} = \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{f}]$$

Если $\frac{\partial \hat{f}}{\partial t} = 0$, ~~и~~ $[\hat{H}, \hat{f}] = 0$, то $\dot{\hat{f}} = 0$

→ физ. величина сохраняется

в класс. механике

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial f}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) =$$

$$= \left\{ \begin{array}{l} \text{ур-я Гамильтона} \\ \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \end{array} \right\} =$$

$$= \frac{\partial f}{\partial t} + \underbrace{\sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right)}_{\text{классич. скобка Пуассона}}$$

$[\hat{H}, \hat{f}]$ → квант. скобка Пуассона

В кл. пределе $\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{f}]$ должно переходить в класс. ск. П.

Стационарные состояния

Гамильтониан замкн системы явно не зависит от времени т.к однородность времени.

⇒З.С.Э. Стационарные состояния — энергия имеет постоянное значение, т.е сохраняется

$\hat{H}\psi_n(q,t) = E_n\psi_n(q,t)$

→ подст. в ур-е Шредингера

$i\hbar\frac{\partial\psi_n(q,t)}{\partial t} = \hat{H}\psi_n(q,t)$

$i\hbar\frac{\partial\psi_n(q,t)}{\partial t} = E_n\psi_n(q,t)$

$\psi_n(q,t) = \varphi_n(t)\psi_n(q)$

$\Rightarrow\quad i\hbar\frac{\partial\varphi_n(t)}{\partial t}\psi_n(q) = E_n\psi_n(q)\varphi_n(t)$

$\Rightarrow \frac{i\hbar}{\varphi_n(t)}\frac{\partial\varphi_n(t)}{\partial t} = E_n$

$\Rightarrow \varphi_n(t) = C_n\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right)$

$\psi_n(q,t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right)\cdot\psi_n(q)$

– зависимость в.ф. стац. состояния от времени.

В стационарном состоянии средн значение физ. величины

$$\langle f_n \rangle = \int dq\, \psi_n^*(q,t)\, \hat{f}\, \psi_n(q,t) = \int dq\, \psi_n^*(q)\, \hat{f}_n(q)$$

если оператор физ. величины коммут с H,

то она будет сохраняться в стационарном состоянии

Если одному собственному значению энергии отвечает несколько волн. ф-ций, то такие состояния называются вырожденными.

$$E_n: \quad f_{n1} \quad f_{n2} \quad f_{n3} \ldots \quad f_{nk}$$

$$\psi_{n1} \quad \psi_{n2} \quad \psi_{n3} \ldots \psi_{nk}$$

$$\hat{H}\psi_{n,\varkappa}(q) = E_n \psi_{n,\varkappa}(q)$$

$\varkappa = 1, 2 \ldots k$ - сост. вырождено, k - кратность вырождения

Если Гамильтониан системы состоит из нескольких частей

$$\hat{H} = \hat{H}_1(q_1) + \hat{H}(q_2) + \ldots,$$ то ур. Шр.

распадается на ряд уровней

$$\hat{H}_1(q_1)\,\psi_1(q_1) = \varepsilon_1 \psi_1(q_1)$$

$$\hat{H}_2(q_2)\,\psi_2(q_2) = \varepsilon_2 \psi_2(q_2)$$

$$\ldots$$

т.к. $\hat{H}\psi(q_1, q_2, q_3 \ldots) = E\psi(q_1, q_2, \ldots)$, то

$$\psi(q_1, q_2 \ldots) = \psi_1(q_1)\,\psi_2(q_2) \cdot \ldots$$

$$E = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \ldots$$

Стац. состояние дискр. спектра всегда соотв финитному движению системы (система или её части не уходят на бесконечность) → система в связанном состоянии.

Стац. сост. непрерывн. спектра всегда соотв инфинитному движению системы.

Алгебра матриц.

1. Сопоставление оператора матрице

$\psi = \sum_n a_n \psi_n (q,t)$ дискр.

$\langle f \rangle = \int dq \psi^* \hat{f} \psi = \sum_n \sum_m a_n^* a_m \int dq \psi_n^* \hat{f} \psi_m$

$f_{nm}(t) = \int dq \; \psi_n^* \hat{f} \psi_m (q,t)$

$\psi = \int dg \; a_g \psi_g (q,t)$ непрер.

$\langle f \rangle = \int dq \; \psi^* \hat{f} \psi = \int dq \; \psi^* \hat{f} \psi =$

$= \int dg \, dg' \; a_g^* \; a_{g'} \; \int dq \, \psi_g^* \hat{f} \psi_g$

$f_{gg'}(t) = \int dq \, \psi_g^*{}_{(q,t)} \hat{f} \; \psi_{g'} \; (q,t)$

2. Определение зависимости элементов от времени для стационарных состояний.

$\psi_n (q,t) = \exp(-\frac{i}{\hbar} E_n t) \, \psi_n (q)$

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

частота перехода из сост m в n

$\dot{f}_{nm}(t) = i\omega_{nm} f_{nm}(t)$

т.к $\dot{f}_{nm}(t) = (\dot{f})_{nm} \, e^{i\omega_{nm} t}$, то

$(\dot{f})_{nm} = i\omega_{nm} f_{nm}$.

3. Докажем, что f^* сопоставится $\hat{f}^+$

$$\langle f^* \rangle = \langle f \rangle^* = \left(\int dq\, \psi^* \hat{f} \psi\right)^* =$$

$$= \int dq\, \psi\, \hat{f}^* \psi^* = \int dq\, \psi^* \tilde{\hat{f}}^* \psi =$$

$$= \int dq\, \psi^* \hat{f}^+ \psi.$$

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

Для матричных элементов

$$(f^*)_{nm} = \int dq\, \psi_n^* \hat{f}^+ \psi_m = \int dq\, \psi_n^* \tilde{\hat{f}}^* \psi_m =$$

$$= \int dq\, \psi_m \hat{f}^* \psi_n^* = \left(\int dq\, \psi_m^* \hat{f} \psi_n\right)^* =$$

$$= (f_{mn})^* = f_{mn}^*.$$

Если физ. величина, то $f_{nm} = f_{mn}^*$

$\Rightarrow$ эрмитовые матрицы

$$\operatorname{Im} f_{nn} = 0.$$

$$f_{nn} = \langle f \rangle_n.$$

4. Правило перемножения матриц.

$$\hat{f} \psi_n(q) = \sum_m f_{mn} \psi_m$$

Домножим слева на ψ_m^* и $\int$

т.к $\int dq\, \psi_m^*(q)\, \psi_m(q) = \delta_{mn}$, то

$$f_{mn} = \int dq\, \psi_m^*(q) \hat{f} \psi_m(q)$$

берем 2 оператора и действуем

$$(\hat{f}\hat{g})\psi_n = \hat{f}(\hat{g}\psi_n) = \hat{f}\sum_k g_{kn}\psi_k =$$

$$= \sum_k g_{kn}\hat{f}\psi_k = \sum_k g_{kn}\sum_m f_{mk}\psi_m = \sum_{m,k} f_{mk}g_{km}\psi_m =$$

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

отсюда $\Rightarrow$ $(\hat{f}\hat{g})_{mn} = \sum_k f_{mk}g_{km}$

также как и обычно $\rightarrow$ строчки на столбцы.

5. Докажем, что матрица эквивалентна оператору.

$\psi(q) = \sum_m a_m \psi_m(q)$ подставим в $\hat{f}\psi(q) = f\psi(q)$

$$\sum_m a_m \hat{f}\psi_m(q) = f\sum_m a_m\psi_m(q)$$

Домножим слева на ψ_n^* и $\int$.

$$\sum_m a_m f_{nm} = \sum_m f a_m \delta_{nm}$$

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

$\rightarrow$ это система однородных алгебраических уравнений первой степени с неизвестными a_m.

Такая система имеет нетривиальное решение, если определитель $= 0$

$$\begin{vmatrix} f_{11} - f & f_{21} & f_{31} & \cdots \\ f_{12} & f_{22} - f & f_{32} & \cdots \\ f_{13} & f_{23} & f_{33} - f & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{vmatrix} = 0$$

Если в качестве ~~собств~~ ф-ций $\psi_n(q)$ взять собственные ф-ии оператора $\hat{f}$, то из

$$\psi_n^* \times \mid \hat{f}\psi_m(q) = f_m \psi_m(q) \quad \text{и} \int, \text{ то}$$

$$f_{nm} = f_m \delta_{nm}$$

То получим диагон. матрицу, и диаг. элемент будут соответствовать собственным значениям физ. величин

6. Докажем, что если два оператора коммутируют, то они имеют общую систему собств значений

$$\hat{f}\hat{g} = \hat{g}\hat{f}$$

$$\sum_k f_{mk} g_{kn} = \sum_k g_{mk} f_{kn}$$

$$\hat{f}\psi_n = f_n \psi_n, \quad f_{mk} = f_m \delta_{mk}, \quad f_m g_{mn} = f_n g_{mn}$$

$$(f_m - f_n) g_{mn} = 0$$

$$m \neq n \Rightarrow g_{mn} = 0$$

$\Rightarrow$ матрица g_{mn} диагональная тоже, т.е $\psi_n(q)$ представляют собой также и собственные ф-ии оператора $\hat{g}$.

7. Случай, когда величины $\hat{H}, E_n, \psi_n$ зависят от λ.

$\Rightarrow \hat{H}(\lambda), E_n(\lambda), \psi_n(\lambda)$

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

дифф по λ:

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

Домножим слева на $\psi_n^*(\lambda)$ и $\int$.

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

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

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

т.к. $\hat{H}(\lambda)\psi_n(\lambda) = E_n(\lambda)\psi_n(\lambda)$

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

8. Переход от одной полной системы ортонормир ф-ий к другой. → каноничное преобразование

Осуществляется при помощи унитарного оператора. В матричной форме:

Пусть оператор $\hat{F}$ осущ. переход. $\varphi_n(q) = \hat{F}\psi_n(q)$

В матр форме: $\varphi_n(q) = \sum_m F_{mn} \psi_m(q)$

где $F_{mn} = \int dq\, \psi_m^* \hat{F} \psi_n(q)$

Обратное преобразование $\psi_n(q) = F^{-1}\varphi_n(q) = \hat{F}^+\varphi_n(q)$

$$\psi_n(q) = \sum_m F_{nm}^* \varphi_m(q)$$

$$\hat{F}^+\hat{F} = 1, \qquad \hat{F}\hat{F}^+ = 1$$

В матр.ф. $\sum_k F_{km}^* F_{kn} = \delta_{nm}, \quad \sum_k F_{mk} F_{nk}^* = \delta_{nm}$

Преобразование оператора физ величины

$$\int dq\, \psi_m^* \hat{f}_\varphi \varphi_n(q) = \int dq [\hat{F}^* \psi_m^*(q)] \hat{f}_\varphi \hat{F} \psi_n(q) =$$

$$= \int dq\, \psi_m^*(q) \underbrace{\hat{F}^{-1} \hat{f}_\varphi \hat{F}}_{\hat{f}_\psi} \psi_n(q)$$

$$\hat{f}_\psi = \hat{F}^+ \hat{f}_\varphi \hat{F} \,; \qquad \hat{f}_\varphi = \hat{F} \hat{f}_\psi \hat{F}^+$$

длина вектора инвариантна по отн к преобр.

$$\sum_n |\varphi_n|^2 = \sum_n |\psi_n|^2$$

9. След.

Сумма диагональных элементов матрицы наз-ся след и обозначается $Sp\,\hat{f}$ $(Tr\,\hat{f})$

$$Sp\,\hat{f} = \sum_n f_{nn}$$

Свойства:

1) $Sp(\hat{f}\hat{g}) = Sp(\hat{g}\hat{f})$

2) $Sp(\hat{f}\hat{g}\hat{h}) = Sp(\hat{g}\hat{h}\hat{f}) = Sp(\hat{h}\hat{f}\hat{g})$

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

$= Sp(\hat{f}_\varphi\hat{F}\hat{F}^{-1}) = Sp(\hat{f}_\varphi)$

инвариант от унитарного преобразования → представления

Импульс

В классической механике з.с.и является следствием однородности пространства, также и в квантовой механике.

Гамильтониан замкнутой физ. системы, не находящейся во вн. поле инвариантен относительно параллельного переноса, т.к все положения в пространстве эквивалентны

Параллельный перенос: $\vec{r}_a \to \vec{r}_a + \delta\vec{r}$ инфинитеземальное преобразование

$$\Rightarrow \psi(\vec{r}_1 + \vec{\delta r}, \vec{r}_2 + \vec{\delta r}_2, \ldots) \overset{\text{в ряд}}{=} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots) +$$

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

$$\Rightarrow \hat{O} = 1 + \delta\vec{r} \sum_a \nabla_a$$

$$\hat{O}(\hat{H}\psi) = \hat{H}(\hat{O}\psi) \, ; \quad \hat{O}\hat{H} - \hat{H}\hat{O} - [\hat{O}, \hat{H}] = 0$$

Если какой-то оператор коммутирует с Гамильтонианом, то соответствующая физ величина должна сохраняться. Т.к сохранение величин исходит и однородности пространства, то эта величина — импульс.

Т.е соотношение $\left(\sum_a \nabla_a\right)\hat{H} - \hat{H}\left(\sum_a \nabla_a\right) = 0$

является законом сохранения импульса, а

оператор ∇ является с точностью до коэфф.

оператором импульса $\hat{\vec{p}} = \gamma \nabla$

Найдем коэф γ с помощью классической мех.

$$\psi = a e^{\frac{i}{\hbar} S}$$

медленно меняется

$$\hat{\vec{p}}\psi = \gamma \nabla \psi = \gamma \frac{i}{\hbar} (\nabla S)\psi$$

В кл. мех $\vec{p} = \nabla S$, тогда $\gamma = -i\hbar$

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla \qquad \hat{\vec{p}} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial \vec{r}}$$

$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ и т.д.

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

Докажем эрмитовский.

Воспольз двумя ф-циями удовл. условию

$$\lim_{x\to\pm\infty} \psi(x) = \lim_{x\to\pm\infty} \varphi(x) = 0$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi(x)\, \hat{p}_x \varphi(x) = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi \frac{d\varphi}{dx} = \overbrace{\cancel{-i\hbar\, \psi(x)\varphi(x)\Big|_{-\infty}^{+\infty}}}^{0} +$$

$$+ i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \varphi \frac{d\psi}{dx} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \varphi\, \hat{p}_x^{*} \psi = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi\, \hat{p}_x^{+} \varphi.$$

$$\Rightarrow \hat{p}_x = \hat{p}_x^{+}$$

Найдем собственную функцию оператора.

$$\hat{\vec{p}}\,\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \vec{p}\,\psi_{\vec{p}}(\vec{r})$$

$$-i\hbar \frac{d\psi_{\vec{p}}(\vec{r})}{d\vec{r}} = \vec{p}\,\psi_{\vec{p}}(\vec{r})$$

Решение $\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = c\,e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}$

Из усл нормировки (непрерывный спектр)

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

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

$$|c|^2 (2\pi\hbar)^3\, \delta(\bar{p}'-\bar{p}) = \delta(\bar{p}-\bar{p}')$$

$$|c|^2 (2\pi\hbar)^3\, \delta(\bar{p}'-\bar{p}) = \delta(\bar{p}-p')$$

$$|c|^2 (2\pi\hbar)^3 = 1$$

$$\Rightarrow c = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$$

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}$$

Разложение произвольной ф-ии по собственным ф-иям оператора импульса представляет собой разложение ее в интеграл Фурье

$$\psi(\vec{r}) = \int d^3p\, a(\vec{p})\,\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p\, a(\vec{p}) \exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}\right)$$

Коэфф разложения $a(\vec{p})$ {обратное преобр. Фурье}

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

$|\psi(\vec{r})|^2$ - плотность вероятности распределения коорд

$|a(\vec{p})|^2$ - —"— импульсов.

Оператор переноса на конечное расстояние a

$\hat{T}_{\vec{a}}\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r}+\vec{a}) =$ разложим в ряд Тэйлора

$= \psi(\vec{r}) + (\vec{a}\nabla)\psi(\vec{r}) + \frac{1}{2!}(\vec{a}\nabla)^2\psi(\vec{r}) + \ldots =$

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

$= e^{\frac{i}{\hbar}\vec{a}\hat{\vec{p}}}\psi(\vec{r})$, Отсюда $\hat{T}_{\vec{a}} = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{a}\hat{\vec{p}}\right)$

Т.к оп. импульса эрмитов, то $\hat{T}$ - унитарный.

Коммутационные соотношения

$y\hat{P}_x - \hat{P}_x y = 0$ и т.д.

$(\hat{x}\hat{P}_x - \hat{P}_x x)\psi(x) = -i\hbar\left(x\frac{d}{dx} - \frac{d}{dx}x\right)\psi(x) = -i\hbar x\frac{d\psi}{dx} +$

$+ i\hbar\psi + i\hbar x\frac{d\psi}{dx} = i\hbar\psi(x)$

$\Rightarrow [x, \hat{P}_x] = i\hbar \qquad [x_i, \hat{P}_k] = i\hbar\delta_{ik}$

$[\vec{r}, \hat{\vec{P}}] = 3i\hbar$

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

Соотношения неопределенностей.

2 эрмитовских оператора

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

Средние значения соотв физ величин в состоянии, описываемом $\psi(q)$:

$< F > = \int dq\, \psi^{*} \hat{F} \psi$; $< G > = \int dq\, \psi^{*} \hat{G} \psi$

Обозначим операторы

$\widehat{\Delta F} = \hat{F} - < F >$; $\widehat{\Delta G} = \hat{G} - < G >$

$[\widehat{\Delta F}, \widehat{\Delta G}] = ik$

Вводим функционал

$$I(\alpha) = \int dq\, |(\alpha \widehat{\Delta f} - i\widehat{\Delta g})\psi(q)|^2 \geqslant 0 \quad \text{Im}\,\alpha = 0$$

положит. полуопределен

$$I(\alpha) = \int dq\, [(\alpha \widehat{\Delta F} - i\widehat{\Delta G})\psi][\alpha(\widehat{\Delta F})^{*} + i(\widehat{\Delta G})^{*})\psi^{*}] =$$

$$= \text{транспонирование} = \int dq\, \psi^{*}[\alpha \widehat{\Delta F}^{+} + i\widehat{\Delta G}^{+}][\alpha \widehat{\Delta F} - i\widehat{\Delta G}]\psi =$$

$$= \int dq\, \psi^{*}[\alpha^2 \widehat{\Delta F}^{+}\widehat{\Delta F} + \widehat{\Delta G}^{+}\widehat{\Delta G} - i\alpha(\widehat{\Delta F}^{+}\widehat{\Delta G} - \widehat{\Delta G}^{+}\widehat{\Delta F})]\psi =$$

$$= \{\text{операторы эрмитовские}\} = \int dq\, \psi^{*}[\alpha^2(\widehat{\Delta F})^2 + (\widehat{\Delta G})^2 + \alpha\hat{k}]\psi =$$

$$= \alpha^2 < (\widehat{\Delta F})^2 > + < (\widehat{\Delta G})^2 > + \alpha < \hat{k} > \geqslant 0$$

Если это неравенство вып-ся в минимуме, то оно вып всюду. Найдем экстремум: приравняем производную нулю.

$$J'(\alpha) = 2\alpha \langle (\widehat{\Delta F})^2\rangle + \langle \hat{k} \rangle = 0$$

$$\alpha_0 = -\frac{\langle \hat{k} \rangle}{2\langle(\widehat{\Delta F})^2\rangle}$$

т. к. $I''(\alpha) = 2\langle(\widehat{\Delta F})^2\rangle > 0 \Rightarrow$ минимум

$$I_{min} = \frac{\langle \hat{k}\rangle^2 \cancel{\langle(\widehat{\Delta F})^2\rangle}}{4\langle(\widehat{\Delta F})^2\rangle^{\cancel{2}}} + \langle(\widehat{\Delta G})^2\rangle - \frac{\langle\hat{k}\rangle^2}{2\langle(\widehat{\Delta F})^2\rangle} \geqslant 0$$

$$\Rightarrow \underbrace{\langle(\widehat{\Delta F})^2\rangle}_{\text{дисперсия}} \langle(\widehat{\Delta G})^2\rangle \geqslant \frac{1}{4}\langle\hat{k}\rangle^2$$

$\hat{F} = x$, $\hat{G} = \hat{p}_x$, $[x, \hat{p}_x] = i\hbar \Rightarrow \hat{k} = \hbar$

$$\Rightarrow \langle(\Delta x)^2\rangle \langle(\widehat{\Delta p_x})^2\rangle \geqslant \frac{1}{4}\hbar^2$$

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

$\delta p_x = \sqrt{\langle(\widehat{\Delta p_x})^2\rangle}$

$$\Rightarrow \delta x\, \delta p_x \geqslant \frac{1}{2}\hbar$$

$\langle E_{кин}\rangle = \frac{\langle p^2\rangle}{2m} \geqslant \frac{\hbar^2}{8ma^2}$. Можно сделать оценку для электрона в ядре: $R_{яд} \approx 3\cdot 10^{-13}$ $m_e \approx 10^{-27}$ г

$$\Rightarrow \langle E_{кин}\rangle \geqslant \frac{10^{-54}}{8\cdot 10^{-27}\cdot 3^2\cdot 10^{-26}\cdot 1.6\cdot 10^{-12}} = 10^9 \text{ эВ},$$ ~~что [illegible]~~

в природе таких энергий нет.

Можно написать еще одно соотношение неопределенности

$\delta E\, \delta t \geqslant \frac{1}{2}\hbar$, но следует понимать, что t измеряется макроскопическим таймером, нет оператора времени и соотв дисперсии.

Т.е для измерение энергии частицы δE нужно затратить δt.

В классической релят. механике приращение действия представляет собой пространственно-временной инвариант. $dS = E dt - p_x dx - p_y dy - p_z dz$.

Уравнения Шредингера

Отталкиваемся от сообр. классической механики

Соотношение $E=\frac{p^2}{2m}$ должно выполн. для соответствующих операторов

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\hat{\vec{p}}^{\,2} \qquad \hat{\vec{p}}^{\,2}=\vec{p}_x^{\,2}+\vec{p}_y^{\,2}+\vec{p}_z^{\,2}, \quad \hat{\vec{p}}=-i\hbar\nabla$$

$$\Rightarrow \hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$$

— получаем Гамильтониан одной свободной частицы

Для системы невзаим. частиц

$$\hat{H}=\sum_a \hat{H}_a=-\frac{\hbar^2}{2}\sum_a \frac{1}{m_a}\Delta_a$$

В кл. механике взаимодействие описывается аддитивным членом потенциальной энергии взаимодействия $U(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\ldots)$

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

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

Напишем волн. ур-е для частицы во вн. поле.

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

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

Ур-е Шредингера для стац. сост.

Если частица свободная, то $U(\vec{r})=0$.

$$\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi+E\psi=0$$

, его решение плоская волна

$$\psi = c\exp\left(-\frac{i}{\hbar}[Et - \vec{p}\vec{r}]\right)$$

энергетический спектр непрерывен $0 \leq E < \infty$

Сост. описыв этой ф-цей вырожденно,

кратность вырождения $- \infty$; (кроме $E=0$)

Запишем квазиклассическую волн. ф-цию и подставим.

$$\psi = a e^{\frac{i}{\hbar}S}$$

$$i\hbar\frac{\partial a}{\partial t} - a\frac{\partial S}{\partial t} = \left\{ \nabla\psi = \nabla(\nabla\psi) = \nabla\left\{(\nabla a)e^{\frac{i}{\hbar}S} + \frac{i}{\hbar}(\nabla S)\times\right.\right.$$

$$\times a e^{\frac{i}{\hbar}S}\Big\} = \Big\{(\Delta a) + \frac{i}{\hbar}(\nabla a)(\nabla S) + \frac{i}{\hbar}(\Delta S)a + \frac{i}{\hbar}(\nabla S)(\nabla a) -$$

$$\left. - \frac{1}{\hbar^2}(\nabla S)^2 a\Big\} e^{\frac{i}{\hbar}S} \text{ и сокращаем экспоненту} \right\} =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\Delta a + 2\frac{i}{\hbar}(\nabla a)(\nabla S) + \frac{ia}{\hbar}(\Delta S) - \frac{1}{\hbar^2}(\nabla S)^2 a\right] + Ua$$

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

$$+ \frac{a}{2m}(\nabla S)^2 + Ua = 0$$

т.к a и S действительные, то приравняем к

нулю действит. и мнимую часть.

$$a\frac{\partial S}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta a + \frac{a}{2m}(\nabla S)^2 + Ua = 0 \quad \Big| \times \frac{1}{a}$$

и

$$-i\hbar\frac{\partial a}{\partial t} - \frac{i\hbar}{m}(\nabla S)(\nabla a) - \frac{i\hbar a}{2m}\Delta S = 0$$

В первом ур-ии $\hbar$-то и получаем

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

а это уже ур-е Гамильтона - Якоби.

Из 2-го ур-я:

$$\frac{\partial a}{\partial t}+\frac{1}{m}(\nabla a)(\nabla S)+\frac{a}{2m}\Delta S=0 \quad \Big| \times 2a$$

$$\frac{\partial a^2}{\partial t^2}+\operatorname{div}\left(a^2\frac{\nabla S}{m}\right)=0$$

$a^2=|\psi|^2=\rho$ - плотность вероятн. нахожд. частицы в некотор. точке пространства

$\frac{\nabla S}{m}=\vec{v}$ - скорость

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

- это ур-е непрерывности для плотности вероятности

т.е плотность вероятности перемещ в простр.-ю класс законом с классич скоростью $\vec{v}$.

Найдем вероятность нахождения частицы в некотором конечном, но достаточно большом объеме: $\int\limits_{(V)} d^3r\,|\psi|^2$

Берем произв. по времени

$$\frac{d}{dt}\int\limits_{(V)} d^3r\,|\psi|^2=\int\limits_{(V)} d^3r\left\{\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi+\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}\right\}=$$

$$=\Big\}\ i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi \Rightarrow \frac{\partial\psi}{\partial t}=\left[\frac{i\hbar}{2m}\Delta-\frac{i}{\hbar}U\right)\psi$$

$$\frac{\partial\psi^*}{\partial t}=-\left(\frac{i\hbar}{2m}\Delta-\frac{i}{\hbar}U\right)\psi^*\Big\}=$$

$$=\frac{i\hbar}{2m}\int\limits_{(V)} d^3r\left(\psi^*\Delta\psi-\psi\Delta\psi^*\right)=$$

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

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

по т. О-Г.

т.е $$\frac{d}{dt} \int\limits_{(V)} d^3r\, |\psi|^2 = -\int\limits_{(V)} d^3r\, \mathrm{div}\, \vec{j} = -\oint\limits_{S} d\vec{S}\, \vec{j}$$

где $\vec{j}$ - вектор плотности потока вероятност

а интеграл - вероятност того, что частица

пересечет поверхност обьема в единиц. врем. времен

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 + \mathrm{div}\, \vec{j} = 0$$

Общие свойства одномерного движения.

одномерное движение → $U(x)$ от одной коорд.

Тогда $\psi(\vec{r}) = \varphi(x)\chi(y,z)$

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

ур-е разобьется на 2. $\quad E = \varepsilon_1 + \varepsilon_2$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2} + [\varepsilon_1 - U(x)]\varphi(x) = 0$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2\chi(y,z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\chi(y,z)}{\partial z^2}\right] + \varepsilon_2\chi(y,z) = 0$$

$$\chi(y,z) = c\exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_y y + p_z z)\right], \quad \varepsilon_2 = \frac{p_y^2 + p_z^2}{2m}$$

К одномерным уравнениям также приводится и задача с $U(\vec{r}) = U_1(x) + U_2(y) + U_3(z)$

Докажем, что в одномерном случае все уровни дискретного спектра невырожденны.

Допустим, что есть две волн. ф-ии $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ удовлетворяющие одному ур-ю Шредингера

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + [E - U(x)]\psi(x) = 0$$

тогда: $\frac{\psi_1''(x)}{\psi_1(x)} = \frac{2m[U(x) - E]}{\hbar^2}$ и $\frac{\psi_2''(x)}{\psi_2(x)} = \frac{2m[U(x) - E]}{\hbar^2}$

$$\Rightarrow \frac{\psi_1''(x)}{\psi_1(x)} = \frac{\psi_2''(x)}{\psi_2(x)}$$

$$\psi_1''(x)\psi_2(x) - \psi_2''(x)\psi_1(x) = 0$$

$$\frac{d}{dx}\left[\psi_1'(x)\psi_2(x) - \psi_1(x)\psi_2'(x)\right] = 0$$

$$\psi_1'\psi_2 - \psi_1\psi_2' = Const$$

Дискр. спектр → движение финитное →

→ волн. ф-ия на ±бесконечности 0.

$$\psi_1'\psi_2 - \psi_1\psi_2' = 0$$

$$\frac{\psi_1'}{\psi_1} = \frac{\psi_2'}{\psi_2} \Rightarrow \psi_1 = C\psi_2$$

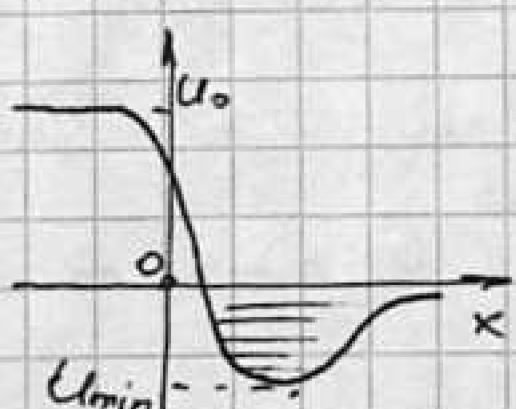
т.к волн. ф-ия определяется с точностью

до константы, то волн. ф-ии совпадают,

следовательно состояние невырожденно.

Рассмотрим случай, когда $U(-\infty) = U_0$,

$U(+\infty) = 0$



1) $U_{min} < E < 0$ финитное движение →

→ дискретный спектр, состояния

не вырожденны.

2) $0 < E < U_0$ - ограничено с одной

стороны, непрерывный спектр, состояние не вырожденны

(аналогично одномерному движению, $\psi_1(-\infty) = \psi_2(-\infty) = 0$

При $x \to +\infty$ ур-е Шредингера $\psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi(x) = 0$

Обозначим $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, тогда решение

в виде бегущих волн $\psi(x) = a \cos(kx + \delta) =$

$= \frac{a}{2}(e^{ikx + i\delta} + e^{-ikx - i\delta})$

Для определения направления куда бежит какая

часть вычислим вектор плотности вероятности

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

$$\vec{j}_1 = \frac{\cancel{2} i\hbar}{\cancel{2} m}(-ik)\frac{\vec{x}}{x}|a|^2 = \frac{\hbar k}{m}|a|^2 \frac{\vec{x}}{x} \to \text{слева направо}$$

$$\vec{j}_2 = -\vec{j}_1 \to \text{справа налево}$$

При $x \to -\infty$ ур-е Шр: $\psi''(x) - \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)\psi = 0$

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

$\psi(x) = Be^{\varkappa x}$, $x < 0 \to$ волновая ф-ия экспоненц. затухает

3) $E > U_0$ $\quad x \to +\infty \quad \psi(x) = a_1 e^{ikx} + a_2 e^{-ikx}$

$x \to -\infty \quad \psi(x) = B_1 e^{\varkappa' x} + B_2 e^{-\varkappa' x}$

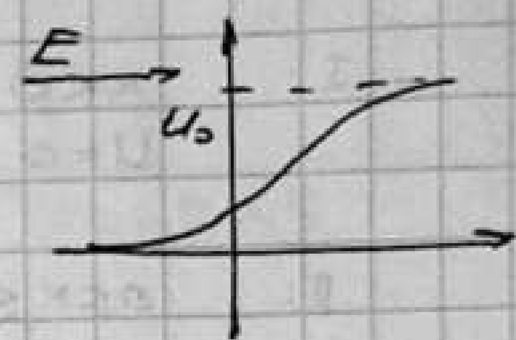
$$\varkappa' = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}$$

Движение инфинитное $\to$ спектр непрерывный

двукратное вырождение по направлениям

движения (влево – вправо).

Коэффициент прохождения



Рассмотрим барьер такого вида:

Если $E > U_0$, то

$$\psi(x) = \underset{\longrightarrow}{A_1 e^{ikx}} + \underset{\longleftarrow}{A_2 e^{-ikx}} \qquad x \to -\infty \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

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

$$\psi(x) = Ce^{i\varkappa x}, \quad x \to +\infty \qquad |\vec{j}_{прох}| = \frac{\hbar\varkappa}{m}|C|^2$$

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

тогда коэфф прохожд барьера $D = \dfrac{|\vec{j}_{прох}|}{|\vec{j}_{пад}|} =$

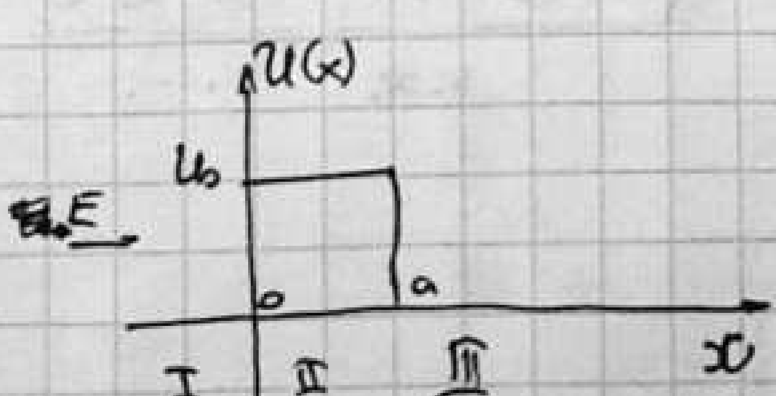
$$= \frac{\varkappa}{k}\left|\frac{C}{A_1}\right|^2$$

коэфф отраж $\Rightarrow$ $R = \dfrac{|\vec{j}_{отр}|}{|\vec{j}_{пад}|} = \left|\dfrac{A_2}{A_1}\right|^2$

$D + R = 1.$

$$\Rightarrow \frac{\varkappa}{k}\left|\frac{C}{A_1}\right|^2 + \left|\frac{A_2}{A_1}\right|^2 = 1$$

Рассмотрим движения частицы в поле прямоугольного барьера.



1) $E > U_0$.

I: $x<0$, $U=0$ $\quad \psi_I(x) = A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx}$

II: $0 \le x \le a$, $U=U_0$ $\quad \psi_{II}(x) = B_1 e^{i\varkappa x} + B_2 e^{-i\varkappa x}$

III: $x>a$, $U=0$ $\quad \psi_{III}(x) = C e^{ikx}$

Сшиваем волновые функции:

$x=0$: $\quad \psi_I(0) = \psi_{II}(0) \Rightarrow A_1 + A_2 = B_1 + B_2$

$\psi_I'(0) = \psi_{II}'(0) \Rightarrow A_1 - A_2 = \frac{\varkappa}{k}(B_1 - B_2)$

$x=a$: $\quad \psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) \Rightarrow B_1 e^{i\varkappa a} + B_2 e^{-i\varkappa a} = C e^{ika}$

$\psi_{II}'(a) = \psi_{III}'(a) \Rightarrow B_1 e^{i\varkappa a} - B_2 e^{-i\varkappa a} = C \frac{k}{\varkappa} e^{ika}$

Ищем $\quad D = \left| \frac{C}{A_1} \right|^2$

A_1 через B_1, B_2

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

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

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

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

$\left. + \left(1-\frac{\varkappa}{k}\right)\left(1-\frac{k}{\varkappa}\right) e^{i\varkappa a} \right\} = \frac{C}{4} e^{ika} \frac{(k+\varkappa)^2 e^{-i\varkappa a} - (k-\varkappa)^2 e^{i\varkappa a}}{k\varkappa}$

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

$$= \frac{16k^2\varkappa^2}{(k+\varkappa)^4 + (k-\varkappa)^4 - 2(k+\varkappa)^2(k-\varkappa)^2\cos 2\varkappa a} =$$

$$= \frac{16k^2\varkappa^2}{k^4+4k^3\varkappa+6k^2\varkappa^2+4k\varkappa^3+\varkappa^4+k^4-4k^3\varkappa+6k^2\varkappa^2-4k\varkappa^3+\varkappa^4 - 2(k^2-\varkappa^2)^2\cos 2\varkappa a} =$$

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

$$= \frac{8k^2\varkappa^2}{k^4+6k^2\varkappa^2+\varkappa^4+(k^2-\varkappa^2)^2 - 2(k^2-\varkappa^2)^2\sin^2\varkappa a} =$$

$$= \frac{4k^2\varkappa^2}{4k^2\varkappa^2 + (k^2-\varkappa^2)^2\sin^2\varkappa a} \quad \Big| \times \frac{1}{4k^2\varkappa^2} =$$

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

При некоторых энергиях барьер прозрачен, т.е $D=1$

$$\Rightarrow \sin\varkappa a = 0, \quad \varkappa_n a = n\pi, \quad n = 1,2,3\ldots$$

$$\varkappa_n = \frac{n\pi}{a}$$

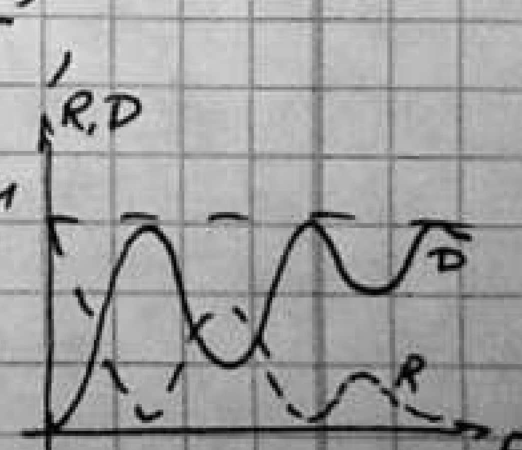
$$\Rightarrow \frac{2m(E_n - U_0)}{\hbar^2} = \frac{n^2\pi^2}{a^2}$$

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} + U_0$$

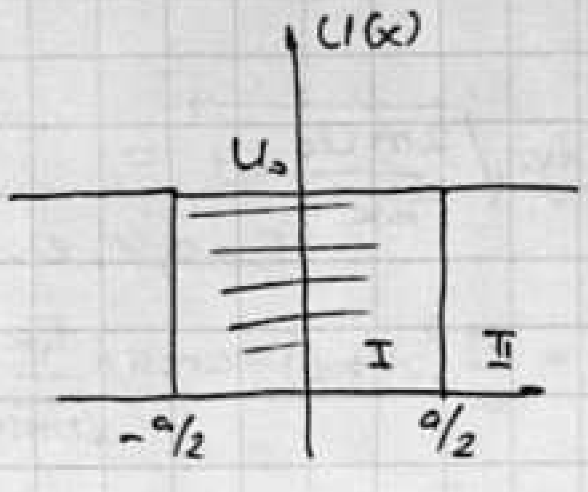
2) $E < U_0 \Rightarrow \varkappa = i\varkappa', \; \varkappa' = \frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}$

$$\sin ia\varkappa' = i\,\mathrm{sh}\,a\varkappa'$$

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



Симметричная прямоугольная потенциальная яма $E < U_0$



ур. Шр: $\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U_0)\right]\psi(x)=0$

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

Т.к потому энергия и весь Гамильтониан инвариантны преобразованию инверсии, то достаточно найти решение уравнения в $x>0$

В этом случае решение может быть четной ф-ией $\psi(-x)=\psi(x)$ или нечетной $\psi(-x)=-\psi(x)$

Ур.е Шр: $\mathrm{I}: \left(\frac{d^2}{dx^2}+k^2\right)\psi_{\mathrm{I}}(x)=0 \quad 0\le x\le \frac{a}{2}$

$\mathrm{II} \quad \left(\frac{d^2}{dx^2}-æ'^2\right)\psi_{\mathrm{II}}(x)=0 \quad x>\frac{a}{2}$

где $k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ $\quad æ'=\frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}$

В яме движение финитное, спектр дискретный.

Решение удобно искать в виде стоячей волны (ищем решение с +четностью)

$$\psi_I^{(+)}(x) = A\cos kx \qquad \psi_{II}^{(+)}(x) = Be^{-\text{æ}'x}$$

Делаем сшивку

1) $A\cos k\frac{a}{2} = Be^{-\text{æ}'\frac{a}{2}}$ $\Rightarrow \operatorname{tg}\frac{ka}{2} = \frac{\text{æ}'}{k}$

2) $A\sin\frac{ka}{2} = B\frac{\text{æ}'}{k}e^{-\text{æ}'\frac{a}{2}}$

$$\operatorname{tg}\frac{ka}{2} = \sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2k^2}-1} \Rightarrow \frac{ka}{2} = l\pi + \operatorname{arctg}\sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2k^2}-1} =$$

$l = 0, 1, 2 \ldots$

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

$2l+1 = n \Rightarrow n = 1, 3, 5 \ldots$

$$k_n^{(+)}a = \pi n - 2\arcsin\frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}}$$

$$E_n^{(+)} = \frac{\hbar^2 k_n^{(+)2}}{2m}, \text{ т.к } \arg\arcsin \leq 1 \Rightarrow 0 \leq k_n \leq \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar}$$

Если $U_0 \to \infty$, то $k_n^{(+)} = \frac{\pi n}{a}$, $n = 1, 3, 5 \ldots$

$$E_n^{(+)} = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2ma^2}$$

Нормировка:

$$A^2\int_{-a/2}^{a/2} dx\cos^2 k_n x = 1 \qquad \leftarrow \text{т.к } \psi_2(x) \xrightarrow{U_0\to\infty} 0$$

$$\psi_I^{(+)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\cos\frac{\pi n x}{a}$$

Для отрицательной четности

$$\psi_I^{(-)}(x) = C\sin kx \qquad \psi_{II}^{(-)} = Be^{-\text{æ}'x}$$

Сшиваем:
$$\begin{cases} C\sin k\frac{a}{2} = Be^{-\frac{\text{æ}'a}{2}} \\ C\cos k\frac{a}{2} = -B\frac{\text{æ}'}{k}e^{-\frac{\text{æ}'a}{2}} \end{cases} \Rightarrow \operatorname{ctg}\frac{ka}{2} = -\frac{\text{æ}'}{k}$$

$$\operatorname{ctg}\frac{ka}{2} = -\sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2 k^2} - 1} \to \frac{ka}{2} = l\pi - \operatorname{arcctg}\sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2 k^2} - 1} =$$

$$= l\pi - \arcsin\frac{\hbar k}{2mU_0}, \quad l = 1, 2, 3 \ldots \quad 2l = n \Rightarrow n = 2, 4, 6 \ldots$$

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

$$E_n^{(-)} = \frac{\hbar^2 k_n^{(-)2}}{2m} \qquad 0 \le k_n^{(-)} \le \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar}$$

$U_0 \to \infty$

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

Докажем, что в яме есть хотя бы один уровень:

при приближении к $k_{max} = \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar}$ получим

$$k_{max}\, a > \pi n - 2\arcsin\frac{\hbar k_{max}}{\sqrt{2mU_0}}$$

$$k_{max}\, a > \pi(n-1) \Rightarrow k_{max} > \frac{\pi(n-1)}{a}$$

Подставим $k_{max} \Rightarrow a\sqrt{2mU_0} > \pi(n-1)\hbar$

При $n = 1 \Rightarrow$ это условие всегда верно

Результат полученный при решении одномерной ямы можно обобщить для трехмерной ямы

$$U_1(x) = \begin{cases} 0, & 0 \le x \le a/2 \\ U_0, & x > a/2 \end{cases} \qquad U_2(y) = \begin{cases} 0, & 0 \le y < \frac{b}{2} \\ U_0, & y > \frac{b}{2} \end{cases}$$

$$U_3(z) = \begin{cases} 0, & 0 \le z \le c/2 \\ U_0, & z > c/2. \end{cases}$$

~~беско~~

$$E_{n_1, n_2, 3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2}\right), \quad n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3 \ldots$$

бесконечноглубокая трехмерная яма

Если $a \neq b \neq c$, то каждому значению ~~эн~~ в. энергии отвечает одно вф, т.е вырождения нет

Если $a = b = c$, то яма симметричная, то

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$$

Равные энергии вырожденны, поэтому например

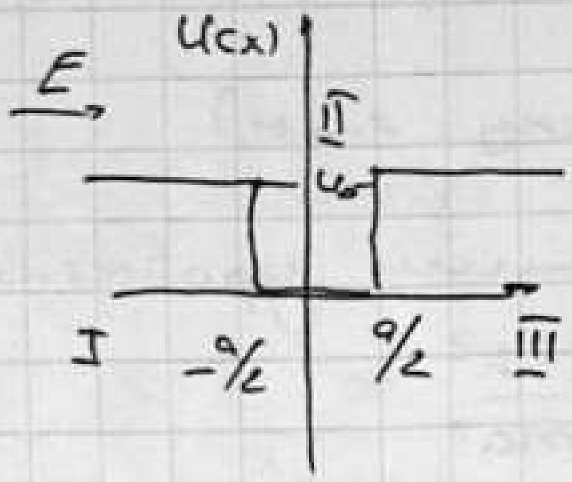
при $\{5, 1, 1\}$, $\{1, 5, 1\}$, $\{1, 1, 5\}$, $\{3, 3, 3\}$

имеем $E = 27 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$

Первые три возникают ввиду симметрии ямы. (вырождение по перестановке кв. чисел),

а последнее $\to$ случайное вырождение

Симметричная прямоугольная потенциальная яма $E > U_0$



Спектр – непрерывный с дв инфин.

Решение → бегущие волны

$$\text{I}: \left(\frac{d^2}{dx^2} + \varkappa^2\right)\psi_I(x) = 0 \quad x < -\frac{a}{2}$$

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

$$\text{II} \quad \left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2\right)\psi_I(x) = 0 \quad -a/2 \le x \le a/2$$

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

$$\text{III}, \quad \left(\frac{d^2}{dx^2} + \varkappa^2\right)\psi_{III}(x) = 0 \quad x > \frac{a}{2}$$

$$\psi_I(x) = \overrightarrow{A_1} e^{i\varkappa x} + \overleftarrow{A_2} e^{-i\varkappa x}$$

$$\psi_{II}(x) = B_1 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx}$$

$$\psi_{III}(x) = C e^{i\varkappa x}$$

Решение такое же как и в задаче о потенц прямоуг. барьере с точн до замены k на $\varkappa$, т.е коэф прохождения равен $D = \dfrac{1}{1 + \left[\dfrac{(k^2-\varkappa^2)\sin ka}{2k\varkappa}\right]^2}$

$D = 1$, если $\sin ka = 0$, $k_n a = \pi n$, $n = 1, 2, 3\ldots$

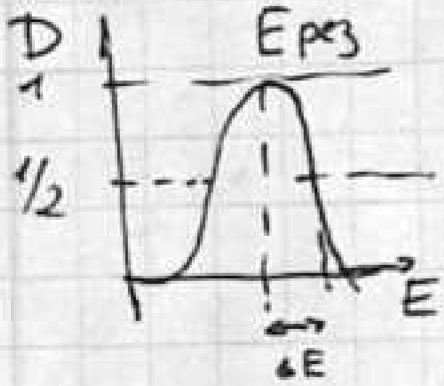
$$\Rightarrow k_n = \frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar} \Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2} > U_0$$

$\Rightarrow$ Следовательно n должны быть больше $n > \dfrac{\sqrt{2mU_0}}{\pi\hbar} a$

Значения энергий E_n наз-ся резонансными, а состояния – виртуальными уровнями энергии. (т.к выражение для E_n совпадает с таким же для бесконечно глубокой потенц. ямы)

Расстояние между ближайшими уровнями энергии: $E_{n+1} - E_n = (2n+1)\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$

Определим полуширину уровня



$k_n = \frac{\pi n}{a}$; $E_n = \frac{\pi^2 h^2 \hbar^2}{2ma^2}$; $D = 1$.

$k_n' = k_n + q_{\text{малое}}$; – для $D = 1/2$

$$\frac{1}{2} = \frac{1}{1 + \underbrace{\left[\frac{(k_n'^2 - \varkappa^2)\sin k_n' a}{2k_n' \varkappa}\right]^2}_{=1}} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \left|\frac{(k_n'^2 - \varkappa^2)\sin k_n' a}{2k_n' \varkappa}\right| = 1 \Rightarrow$$

$$|\sin k_n' a| = |\sin(k_n a + qa)| = |\sin(\pi n + qa)| = |\sin qa| =$$

$$= \{ q \ll k_n \Rightarrow aq \ll 1 \} \approx qa$$

Пренебрежем добавкой в числителе и знаменателе

$$\left|\frac{(k_n^2 - \varkappa^2) qa}{2k_n \varkappa}\right| = 1$$

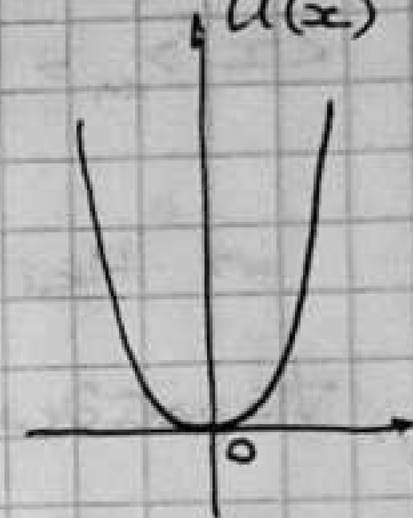
$$|aq| = \frac{2k_n \varkappa}{|k_n^2 - \varkappa^2|} \qquad |q| = \frac{2k_n \varkappa}{a\,|k_n^2 - \varkappa^2|}$$

$$\Delta E = E_n^{(\frac{1}{2})} - E_n^{(1)} = \frac{\hbar^2 k_n'^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_n'^2 - k_n^2\right) =$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\left((k_n + q)^2 - k_n^2\right) = \frac{\hbar}{2m}\left(2k_n|q|\right) = \frac{\hbar^2 k_n}{m}|q| =$$

$$= \frac{2\hbar^2 k_n^2 \varkappa}{ma\,|k_n^2 - \varkappa^2|}$$

Гармонический осциллятор.



Часто ~~the~~ пот. энергия имеет вид:

Разложим вблизи 0:

$$U(x) = U(0) + \frac{\partial U(x)}{\partial x}\Big|_{x=0} \cdot x +$$

$$+ \frac{1}{2}\frac{\partial^2 U(x)}{\partial x^2}\Big|_{x=0} x^2 + \ldots$$

Выбираем координаты так, чтобы $U(0) = 0$ и

т.к экстремум $U'(0) = 0$. $\Rightarrow$

Обозначим $k = \frac{\partial^2 U(x)}{\partial x^2}\Big|_{x=0} > 0$ $\leftarrow$ т.к минимум

Классическая ф-ия Гамильтона:

$$H_{кл} = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2}$$

Пишем ур-е Гамильтона.

$$\dot{p} = -\frac{\partial H_{кл}}{\partial x} = -kx \Rightarrow \dot{p} = -kx$$

$$\dot{x} = \frac{\partial H_{кл}}{\partial p} = \frac{p}{m} \Rightarrow \dot{x} = \frac{p}{m} \Rightarrow p = m\dot{x}$$

$$\Rightarrow \dot{p} = m\ddot{x} : \quad \underline{m\ddot{x} + kx = 0}$$

$$\omega^2 = \frac{k}{m} \Rightarrow \ddot{x} + \omega^2 x = 0$$

$$x(t) = A\cos(\omega t + \alpha)$$

$k = m\omega^2$

$$p = m\dot{x} \Rightarrow p(t) = -A\omega m \sin(\omega t + \alpha)$$

Подставим в $H_{кл} = \frac{1}{2}A^2 m\omega^2$

Среднее значение квадрата координаты x за период $T = \frac{2\pi}{\omega}$

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

$$\text{"} \ 1/2\, T$$

$$\Rightarrow H_{кл} = m\omega^2 \langle x^2 \rangle_{кл}.$$

Перейдем к операторам

$$p \to i\hbar \frac{d}{dx}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{m^2\omega^2 x^2}{\hbar^2}\right)$$

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$$

ур. Шр: $\left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{m^2\omega^2 x^2}{\hbar^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\right)\psi(x) = 0$

Перейдем к безразмерным величинам

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\,\xi \qquad E = \frac{\hbar\omega}{2}\varepsilon$$

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

ищем решение в виде

Нас интересует решение с г.у. $\lim\limits_{\xi \to \pm\infty} \psi(\xi) = 0$

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

Подставим в ур Шр: $\psi''(\xi) = C[v'' - v - \xi v' - \xi v' + \xi^2 v]e^{-\frac{\xi^2}{2}} = C[v'' - v - 2\xi v' + \xi^2 v]e^{-\frac{\xi^2}{2}}$

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

$v(\xi)$ при $\xi \to \infty$ не должна возрастать быстрее $e^{-\frac{\xi^2}{2}}$,

$\to$ решение для v нужно искать в виде полинома конечной степени от ξ, и такое может быть если $\xi = 2n+1$, $n = 0, 1, 2 \ldots$ и это решения называется полиномы Эрмита.

$$\Rightarrow \psi_n(\xi) = C H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \, \psi_n^*(\xi) \psi_m(\xi) = \delta_{nm}$$ – Нормировка.

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

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

Энергия стационарных состояний:

$E_n = \hbar\omega (n + 1/2)$. Каждому значению энергии соотв вл. ф-ия $\Rightarrow$ вырождение отсутствует.

n – главное квантовое число.

При $n = 0$ $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ – нулевая энергия кв. мех осцилл.

Число узлов волн. ф-ии определяется кв. числом.

$$\langle x \rangle_n = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \, \psi_n^*(\xi) \, x \, \psi_n(\xi) = 0$$ – в силу симметрии т.к. при замене x на $-x$ в-ф-ия не меняется, а $x \to -x$

$$\langle p \rangle_n = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \, \psi_n^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) \psi_n(\xi) = 0$$

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \langle x^2 \rangle$$

$$\langle (\Delta p)^2 \rangle = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = \langle p^2 \rangle$$

Соотношение неопределенностей $\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle \Delta p)^2 \rangle \geqslant \frac{\hbar^2}{4}$

$$\langle x^2\rangle\langle p^2\rangle \geqslant \frac{\hbar^2}{4}$$

$$E = \langle \hat{H}\rangle = \frac{\langle p^2\rangle}{2m} + \frac{m\omega^2\langle x^2\rangle}{2} \geqslant \frac{\hbar^2}{8m\langle x^2\rangle} + \frac{m\omega^2\langle x^2\rangle}{2}$$

Найдем минимум энергии

$$\frac{\partial E}{\partial\langle x^2\rangle} = -\frac{\hbar^2}{8m\langle x^2\rangle^2} + \frac{m\omega^2}{2} = 0 \Rightarrow \langle x^2\rangle_{min} = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

$E \geqslant E_{min} = \frac{1}{2}\hbar\omega$ — минимальная энергия

$$E_{min} = E_0$$

Подтверждено экспериментально.

Найдем среднеквадратичное отклонение

$$\langle \xi^2\rangle_n = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi\, \psi_n^*(\xi)\,\xi^2\,\psi_n(\xi) =$$

рекурентные соотношения для п. Эрмита

$$\xi H_n(\xi) = n H_{n-1}(\xi) + \frac{1}{2} H_{n+1}(\xi)$$

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

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi\, \psi_n^*(\xi)\,\xi\left[\sqrt{\frac{n}{2}}\,\psi_{n-1}(\xi) + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\,\psi_{n+1}(\xi)\right] =$$

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

$$\xi \psi_{n+1}(\xi) = \sqrt{\frac{n+1}{2}}\,\psi_n(\xi) + \sqrt{\frac{n+2}{2}}\,\psi_{n+2}(\xi)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi\, \psi_n^*(\xi)\left[\cancel{\frac{\sqrt{n(n-1)}}{2}\psi_{n-2}} + \frac{n}{2}\psi_n + \frac{n+1}{2}\psi_n + \cancel{\frac{\sqrt{(n+1)(n+2)}}{2}\psi_{n+2}}\right] = n + \frac{1}{2}$$

должно уровл. усл ортонорм $\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi\, \psi_n^*(\xi)\psi_m(\xi) = \delta_{nm}$

Таким образом получим

$$\langle q^2 \rangle_n = n + \frac{1}{2} \qquad \langle x^2 \rangle_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\frac{\hbar}{m\omega}$$

$$\Rightarrow \langle x^2 \rangle_0 = \frac{\hbar}{2m\omega} \rightarrow E_n = m\omega^2 \langle x^2 \rangle_n$$

получили такую же связь как и в класс. мех.

Матричные элементы оператора координаты

$$x_{mn} = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dq\, \psi_m^*(q)\, x\, \psi_n(q) = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\xi\, \psi_m^*(\xi)\, \xi\, \psi_m(\xi) =$$

$$= \left\{ x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\, \xi \right\} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \left[\sqrt{m}\, \delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1}\, \delta_{m,n+1} \right]$$

$\Rightarrow$ Матрица недиагональная

Отличные от 0 элементы:

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

Операторы $\hat{a}, \hat{a}^+$

Рекур. соотн для полиномов Эрмита

$$\frac{dH_n(\xi)}{d\xi} = 2n\, H_{n-1}(\xi)$$

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

Вводим обозначен

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{\partial}{\partial \xi}\right)\psi_n(\xi) = \sqrt{n}\,\psi_{n-1}(\xi) \quad \text{и}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{\partial}{\partial q}\right)\psi_n(\xi) = \sqrt{n+1}\,\psi_{n+1}$$

$$\hat{P}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\ ; \quad \hat{P}_q = -i\frac{\partial}{\partial q}\ ; \quad \hat{P}_x = \sqrt{\hbar\omega m}\,\hat{P}_q$$

$$\frac{\partial}{\partial q} = i\hat{P}_q$$

Тогда $\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(q + \frac{\partial}{\partial q}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(q + i\hat{P}_q\right)$

Вводим операторы

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(q - \frac{\partial}{\partial q}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(q - i\hat{P}_q\right)$$

$$\hat{a}\,\psi_n(q) = \sqrt{n}\,\psi_{n-1}(q)$$

$$\hat{a}^+\psi_n(\xi) = \sqrt{n+1}\,\psi_{n+1}(q)$$

Действуем: $\hat{a}\,\psi_0(q) = 0$, т.к ψ_{-1} не сущ.

$$\left(q + \frac{\partial}{\partial q}\right)\psi_0(q) = 0$$

$$\psi_0(q) = C_0\, e^{-\frac{q^2}{2}} \Rightarrow C_0 = \frac{1}{\pi^{1/4}}$$

$$\psi_n(q) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^n \psi_0(q)$$

$$\hat{a}\hat{a}^+ \psi_n(q) = (n+1)\psi_n(q)$$

$$\hat{a}^+\hat{a}\psi_n(q) = n\psi_n(q)$$

$$\Rightarrow (\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a})\psi_n = \psi_n \quad \Rightarrow \quad [\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$$

$$\left.\begin{aligned} (\hat{a}\,\hat{a}^+)_{mn} &= (n+1)\delta_{mn} \\ (\hat{a}^+\hat{a})_{mn} &= n\,\delta_{mn} \end{aligned}\right\} \text{матрицы диагональны.}$$

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\left(q^2 + \hat{p}_q^2\right) = \left(\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}\right)\frac{\hbar\omega}{2}$$

$$\hat{a}\hat{a}^+ = 1 + \hat{a}^+\hat{a} \Rightarrow$$

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

$$E_n = h\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Оператор момента импульса.

В классической механике з. с. м. и. возникает из изотропности пространства, также и в кв. механике: Гамильтониан должен быть инвариантен относительно поворота вдоль любой оси. Делаем поворот на беск. малый угол: $\delta\vec{\varphi}$. Все частицы получают приращения

$$\delta\vec{r}_a = [\delta\vec{\varphi}, \vec{r}_a]$$

$$\psi(\vec{r}_1 + \delta\vec{r}_1, \vec{r}_2 + \delta\vec{r}_2, \dots) \overset{\text{в ряд}}{=} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots) +$$

$$+ \sum_a \delta\vec{r}_a \nabla_a \psi + \dots = \psi + \sum_a [\delta\vec{\varphi}, \vec{r}_a] \nabla_a \psi \overset{\substack{\text{в смеш.}\\ \text{произвед.}\\ \text{переставим скобки}}}{=}$$

$$= \psi + \delta\vec{\varphi} \sum_a [\vec{r}_a, \nabla_a] \psi = \{1 + \delta\vec{\varphi} \sum_a [\vec{r}_a, \nabla_a]\} \psi$$

Получим оператор поворота на беск. малый угол:

$$\hat{O} = 1 + \delta\vec{\varphi} \sum_a [\vec{r}_a, \nabla_a]$$

$$\hat{O}\hat{H} - \hat{H}\hat{O} = 0 \Rightarrow \sum_a [\vec{r}_a, \nabla_a] \hat{H} - \hat{H} \sum_a [\vec{r}_a, \nabla_a] = 0$$

$\Rightarrow$ величина сохраняется, а это момент импульса системы,

т.е $\sum_a [\vec{r}_a, \nabla_a]$ с точн. до конст

В класс. механике момент импульса $[\vec{r}, \vec{p}]$,

а $p \to -i\hbar\nabla$, то в кв. механике $-i\hbar[\vec{r}, \nabla] = \hbar\hat{l}$

$$\Rightarrow \hat{l} = -i[\vec{r}, \nabla]$$

Распишем компоненты:

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

$$\hbar \hat{l}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z$$

Т.к $[x_i, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{ik}$, $[y, \hat{p}_y] = i\hbar$, то

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

$$[\hat{l}_x, y] = \hbar[y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, y] = iz$$

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

$$= \cancel{y^2\hat{p}_z\psi(y)} - zy\hat{p}_y(\psi) - z\psi(y)\hat{p}_y y - \cancel{y^2\hat{p}_z\psi} + \cancel{yz\hat{p}_y\psi} =$$

$$= i\hbar z\psi(y)$$

$$[\hat{l}_y, z] = ix \quad [\hat{l}_z, x] = iy, \quad [\hat{l}_x, z] = -iy \quad \text{и т.д.}$$

$$\Rightarrow [\hat{l}_i, x_j] = i\varepsilon_{ijk}x_k$$

Аналогично $[\hat{l}_i, \hat{p}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{p}_k$; $[\hat{l}_i, \hat{l}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{l}_k$

Удобно ввести: оператор квадрата м.и.

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

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

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

$$[\hat{l}_z^2, \hat{l}_z] = 0 \qquad \Rightarrow [\hat{\vec{l}}^2, \hat{l}_z] = 0; \quad [\hat{\vec{l}}^2, \hat{l}_x] = 0$$

$$\Rightarrow [\hat{\vec{l}}^2, \hat{l}_y] = 0$$

Также вводятся $\hat{l}_+ = \hat{l}_x + i\hat{l}_y$; $\hat{l}_- = \hat{l}_x - i\hat{l}_y$

$$[\hat{l}_+, \hat{l}_-] = 2\hat{l}_z, \quad [\hat{l}_z, \hat{l}_\pm] = \pm\hat{l}_\pm; \quad \hat{\vec{l}}^2 = \hat{l}_\pm\hat{l}_\mp + \hat{l}_z^2 \mp \hat{l}_z$$

Перейдем к сфер. коорд.

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

Вычислим $\dfrac{\partial}{\partial\varphi} = \dfrac{\partial x}{\partial\varphi}\dfrac{\partial}{\partial x} + \dfrac{\partial y}{\partial\varphi}\dfrac{\partial}{\partial y} + \cancel{\dfrac{\partial z}{\partial\varphi}}\dfrac{\partial}{\partial z} =$

$$= -y\frac{\partial}{\partial x} + x\frac{\partial}{\partial y} = \left\{ \hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \Rightarrow \frac{\partial}{\partial x} = \frac{i}{\hbar}\hat{p}_x \right\} =$$

$$= \frac{\partial}{\partial\varphi} = \frac{i}{\hbar}\left(-y\hat{p}_x + x\hat{p}_y\right) = i\hat{\ell}_z \Rightarrow \hat{\ell}_z = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

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

– с точн. до коэф. опер. Лапласа.

Оператор поворота на конечный угол α

Пусть есть ф-ия $\psi(\varphi+\alpha) = \hat{R}_\alpha\psi(\varphi)$

В ряд Тейлора:

$$\psi(\varphi+\alpha) = \psi(\varphi) + \alpha\frac{d}{d\varphi}\psi(\varphi) + \frac{1}{2!}\alpha^2\frac{d^2}{d\varphi^2}\psi(\varphi) + \ldots =$$

$$= \left\{\frac{d}{d\varphi} = i\hat{\ell}_z\right\} = \psi(\varphi) + i\alpha\,\ell_z(\psi(\varphi)) + \frac{1}{2!}(i\alpha\hat{\ell}_z)^2\psi(\varphi) + \ldots =$$

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

$$\Rightarrow \hat{R}_\alpha = e^{i\alpha\hat{\ell}_z}$$

Собственные значения и собственные функции оператора момента импульса.

Для нахождения ~~в~~ собственных ф-ий и значений оператора $\hat{l}_z$ воспользуемся выражением для него в сферических координатах.

$$-i\frac{d\Phi(\varphi)}{d\varphi} = m\Phi(\varphi) \qquad \hat{l}_z \Phi(\varphi) = m\Phi(\varphi);$$

собств знач $\hat{l}_z$

$$\hat{l}_z = -i\frac{d}{d\varphi}$$

$$\Phi(\varphi) = Ce^{im\varphi}$$

$\Phi(\varphi)$ должна быть однозначной ф-ией, а для этого должно выполняться: при повороте на 2π ничего не должно изменяться: $\Rightarrow m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$

магнитное квантовое число

$\Leftarrow$ дискр. спектр

$$\int_0^{2\pi} d\varphi\, \Phi_m^*(\varphi)\, \Phi_n(\varphi) = \delta_{mn}$$

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$$

Энергия системы в отсутств. вн. поля не зависит от m. (иначе можно было бы поворотом...)

Для m ~~также~~ существует ограничение сверху, т.к.

$$\hat{\vec{l}}^2 - \hat{l}_z^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 \qquad -l \le m \le l$$

l — макс знач. m

$\Rightarrow$ всего $2l+1$ значение

Т.е совместные собственной ф-ии операторов $\hat{l}^2$ и $\hat{l}_z$ должны определяться двумя кв. числами l и m =>

Подействуем: $\hat{l}_z \hat{l}_\pm \psi_{lm}(\theta,\varphi) = (\hat{l}_\pm \hat{l}_z \pm \hat{l}_\pm)\psi_{lm} =$

$$= \hat{l}_\pm (m \pm 1)\psi_{lm} = (m \pm 1)\hat{l}_\pm \psi_{lm}$$

Ф-ия $\hat{l}_\pm \psi_{lm}$ с точн до константы явл. собств ф-ией оператора $\hat{l}_z$ и отвечает собств значению $(m \pm 1)$. =>

$$\psi_{m+1} = C\hat{l}_+ \psi_{m} \; ; \; \psi_{m-1} = C'\hat{l}_- \psi_{m}$$

=> Отличны от нуля только недиагональные матричные элементы $(\hat{l}_+)_{m+1,m}$ и $(\hat{l}_-)_{m-1,m}$

Если в $\psi_{l,m+1} = C\hat{l}_+\psi_{l,m}$ выбрать $m = l$, то

$$\hat{l}_+ \psi_{ll}(\theta,\varphi) = 0. \quad \text{т.к } m \neq l$$

Подействуем $\hat{l}_- \hat{l}_+ \psi_{ll}(\theta,\varphi) = 0$

т.к $\hat{l}_- \hat{l}_+ = \hat{\vec{l}}^2 - \hat{l}_z^2 - \hat{l}_z$, то

$$(\hat{\vec{l}}^2 - \hat{l}_z^2 - \hat{l}_z)\psi_{ll} = 0$$

$$\Rightarrow (\vec{l}^2 - l^2 - l)\psi_{ll} = 0, \text{ где } \vec{l}^2 \text{ - собств знач } \hat{\vec{l}}^2.$$

$$\hat{\vec{l}}^2 \psi_{ll} = l^2 \psi_{ll}$$

Тогда $\vec{l}^2 = \underbrace{l}_{\text{азимутальное кв. число}}(l+1)$

Уровень энергии, характеризующийся ℓ $(2\ell+1)$-раз вырожден по m. (сост с $\ell=0$ невырожденно)

$$\hat{\ell}^2 \psi_{\ell m} = \ell(\ell+1)\psi_{\ell m}$$ перепишем в сфер. коорд.

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi_{\ell m}}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi_{\ell m}}{\partial\varphi^2}+(\ell+1)\ell\,\psi_{\ell m}=0$$

$$\psi_{\ell m}(\theta,\varphi)=\Theta_{\ell m}(\theta)\,\Phi_m(\varphi),$$ где $\Phi_m(\varphi)=\frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$

т.к $\frac{\partial^2\Phi_m(\varphi)}{\partial\varphi^2}=-m^2\Phi_m(\varphi)$ получаем.

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta_{\ell m}}{\partial\theta}\right)-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\Theta_{\ell m}(\theta)+(\ell+1)\Theta_{\ell m}(\theta)=0$$

Конечные и однозначные решения существуют при целых положительных $\ell \geq |m|$ и эти решения — присоединенные полиномы Лежандра $P_\ell^m(\cos\theta)$.

$$Y_{\ell m}(\theta,\varphi)=\Theta_{\ell m}(\theta,\varphi)\,\Phi_m(\varphi)$$ — сфер. ф-ие Лапласа.

Величины $Y_{\ell m}$ образуют полную ортонормированную систему функций: $\int d\Omega\, Y^*_{\ell m} Y_{\ell m'} = \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}$; $d\Omega=\sin\theta d\theta d\varphi$

В представлении своих собств. ф-ий $Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ матрицы операторов $\hat{\ell}^2$ и $\hat{\ell}_z$ диагональны, а их отличные от 0 матр элементы

$$(\hat{\ell}^2)_{\ell m,\ell m}=\langle\hat{\ell}^2\rangle_{\ell m}=\int d\Omega\, Y^*_{\ell m}(\theta,\varphi)\,\hat{\ell}^2\, Y_{\ell m}(\theta,\varphi)=\ell(\ell+1)$$

$$(\hat{\ell}_z)_{\ell m,\ell m}=\langle\hat{\ell}_z\rangle_{\ell m}=\int d\Omega\, Y^*_{\ell m}(\theta,\varphi)\,\hat{\ell}_z\, Y_{\ell m}(\theta,\varphi)=m.$$

Т.к операторы $\hat{l}_x, \hat{l}_y$ не коммутируют с $\hat{l}_z$, то они не имеют определенных значений в состояниях, в которых определенные значения принимает проекция момента на ось z. Т.е в представлении, в котором матрица оператора $\hat{l}_z$ диагональна, матрицы операторов $\hat{l}_x$ и $\hat{l}_y$ будут недиагональными по квантовому числу m.

Т.к $(\hat{l}^2 - \hat{l}_z^2 + \hat{l}_z) Y_{lm}(\theta,\varphi) = \hat{l}_+ \hat{l}_- Y_{lm}(\theta,\varphi)$.

$\times Y_{lm}^*|$ и $\int$ по $d\Omega$. $\Rightarrow$

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

не пишем индекс l у $\hat{l}_+$ и $\hat{l}_-$ т.к они диагональны по этому кв. числу.

т.к $\hat{l}_- = \hat{l}_+^+$ и

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

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

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

Отсюда т.к $\hat{l}_x = \dfrac{\hat{l}_+ + \hat{l}_-}{2}$, $\hat{l}_y = \dfrac{\hat{l}_+ - \hat{l}_-}{2i} = -i\dfrac{\hat{l}_+ - \hat{l}_-}{2}$, получаем отличн. от 0 м.э.

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

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

Четность состояния.

В квантовой механике еще одно преобразование пространства приводит к закону сохранения → инверсия.

Вводим оператор: $x \to -x$, $y \to -y$; $z \to -z$ $\Rightarrow \vec{r} \to -\vec{r}$

Оператор инверсии: $\hat{P}\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r})$

$$\hat{P}^2\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r})$$

Собств. ф-ии $\hat{P}\psi_p(\vec{r}) = P\psi_p(\vec{r})$

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

$\Rightarrow P = \pm 1 \Rightarrow$ собственные ф-ии оператора инверсии могут быть либо четными либо нечетными.

Гамильтониан вообще говоря коммутирует с оп. инверсии

→ возникает з.с. четности: если состояние замкн системы обладает определенной четностью, то оно сохр.

Не сохр четность в слабых взаимодействиях. (β-распад)

Также оператор инверсии коммутирует с оператором момента. $P(l) = (-1)^l$

Сложение моментов

Рассмотрим систему из 2^x слабовзаим. частей

(1)(2)

Выберем величины характеризующие систему

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

нужно перейти к другим: $\hat{\vec{l}}^{\,2},\ \hat{l}_z,\ \hat{\vec{l}}_1^{\,2},\ \hat{\vec{l}}_2^{\,2}$

Для полн. момента условие: $|l_1-l_2|\le l\le l_1+l_2$

Собств знач оп. $\hat{l}_z$ $\quad m=m_1+m_2$

Выразим ψ_{lm} через ψ_{l_1,m_1}, ψ_{l_2,m_2}

$$\psi_{lm}=\sum_{m_1,m_2}\underbrace{(l_1m_1\,l_2m_2|lm)}_{\text{коэфф. Клебша Гордана}}\psi_{l_1m_1}\psi_{l_2m_2}$$

коэфф. Клебша Гордана $\quad R,\ \in[-1,+1]$

и наоборот

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

Коэфф. Клебша - Гордана нормированы:

$$\sum_{m_1m_2}(l_1m_1\,l_2m_2|lm)(l_1m_1\,l_2m_2|l'm')=\delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

и ортогональны:

$$\sum_{l=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2}\sum_{m=-l}^{l}(l_1m_1l_2m_2\,|\,lm)(l_1m_1'\,l_2m_2'|lm)=$$

$$=\delta_{m_1m_1'}\delta_{m_2m_2'}$$

Задача двух тел

В классической механике задача двух тел эквивалентна задаче о движении одной частицы во внешнем поле.

Потенциальная энергия – функция расстояния

$$U = U(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|$$

В класс. механике:

$$L_{кл} = \frac{m_1 \dot{\vec{r}}_1^2}{2} + \frac{m_2 \dot{\vec{r}}_2^2}{2} - U(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|)$$

К новым переменным: коорд ц. масс $\vec{R} = \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1 + m_2}$

$$\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1 \text{ ; Вводим } M = m_1 + m_2 \text{ ; } \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

$$\vec{r}_1 = \vec{R} - \frac{m_2}{m_1 + m_2}\vec{r} = \vec{R} - \frac{\mu}{m_1}\vec{r}$$

$$\vec{r}_2 = \vec{R} + \frac{m_1}{m_1 + m_2}\vec{r} = \vec{R} + \frac{\mu}{m_2}\vec{r}$$

$$\Rightarrow L_{кл} = \frac{M\dot{\vec{R}}^2}{2} - \frac{\mu\dot{\vec{r}}^2}{2} - U(\vec{r})$$

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

$$\vec{p}_1 = m_1\dot{\vec{r}} \text{ ; } \vec{p}_2 = m_2\dot{\vec{r}}_2 \text{ ; } \vec{p}_1 + \vec{p}_2 = \vec{P}$$

$$\frac{m_1}{M}\vec{p}_2 - \frac{m_2}{M}\vec{p}_1 = \vec{p}$$

$$\vec{p}_1 = \frac{m_2}{M}\vec{P} - \vec{p} \text{ ; } \vec{p}_2 = \frac{m_1}{M}\vec{P} + \vec{p}.$$

$$H_{кл} = \frac{\vec{p}_1^{\,2}}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^{\,2}}{2m_2} + U(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|),$$

$$H_{кл} = \frac{\vec{P}^2}{2M} + \frac{\vec{p}^{\,2}}{2\mu} + U(\vec{r})$$

Заменим величины соответств. операторами:

$$\vec{P} \to -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{R}} \;; \quad \vec{p} \Rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{r}}$$

$$\qquad = \nabla_{\vec{R}} \qquad\qquad = \nabla_{\vec{r}}$$

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

=> решение ур-е Шр. $\hat{H}\Psi = E\Psi$ следует искать в виде произв ф-ий $\Psi(\vec{r},\vec{R}) = \varphi(\vec{R})\psi(\vec{r})$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\vec{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\vec{r}} - \mathcal{E}\right]\Psi(\vec{R},\vec{r}) = 0$$

разбивается на два уравнения:

$$\begin{cases} \Delta_{\vec{R}}\, \varphi(R) + \dfrac{2ME'}{\hbar^2}\varphi(\vec{R}) = 0 \\ \Delta_{\vec{r}}\, \psi(\vec{r}) + \dfrac{2\mu[E - U(r)]}{\hbar^2}\psi(\vec{r}) = 0 \end{cases} \qquad E' + E = \mathcal{E}$$

1-е уравнение – уравнение свободного движения част.

$$\varphi(R) = C_1 e^{i\vec{k}\vec{R}} + C_2 e^{-i\vec{k}\vec{R}}, \quad k = \frac{\sqrt{2ME'}}{\hbar}$$

2-е уравнение – относительное движение частиц.

Запишем лапласиан в сфер коорд.

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{1}{r^2}\hat{\ell}^2$$

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

Уравнение опять разделяется: $\psi(\vec{r}) = R(r)\,Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$

т.к. $\hat{\ell}^2 Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = \ell(\ell+1)\,Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$

сферич. ф-ии – собственные ф-ии оператора $\hat{\ell}^2$

$$\Rightarrow \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_\ell(r)}{dr}\right) + \frac{2\mu}{\hbar^2}[E-U(r)]R_\ell(r) - \frac{1}{r^2}\ell(\ell+1)R_\ell(r) = 0$$

ур-е не содержит $m \Rightarrow (2\ell+1)$ раз вырожденные состояния с опред. энергией

Сделаем замену:

$$R_\ell(r) = \frac{\chi_\ell(r)}{r} \Rightarrow$$

$$\frac{d^2\chi_\ell(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}[E-U(r)]\chi_\ell(r) - \frac{1}{r^2}\ell(\ell+1)\chi_\ell(r) = 0$$

т.е. ур-е Шр., но с $U_\ell(r) = U(r) + \underbrace{\frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2\mu r^2}}_{\text{центробежная энергия}}$

$\Rightarrow$ оператор центробежной энергии

$$\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\hat{\ell}^2$$

$\exists$ спектроскопические обозначения.

l	0	1	2	3	4	
	s	p	d	f	g	— состояния

n_r

——— 3 — радиальное квантовое число

——— 2

——— 1

——— 0

Определим поведение рад. ф-ии вблизи начала коорд.

Слабосингулярный потенциал: $\lim\limits_{r\to 0} r^2 U(r) = 0$

Тогда при $r \to 0$ $\quad \frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR_l}{dr}\right) - l(l+1)R_l = 0$

$$R_l = C r^s \Rightarrow s(s+1) = l(l+1)$$

$\Rightarrow s = l$; $\underline{s = -l - 1}$
не удовл. усл. конечности в 0

$$\Rightarrow R_l(r) = C r^l$$

Свободное движение с определенным значением орбитального момента.

$U(r)=0. \Rightarrow E>0$, спектр непрерывный

$$\frac{d^2\chi_{El}(r)}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\chi_{El}(r) + \frac{2mE}{\hbar^2}\chi_{El}(r)=0$$

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

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

Нормировка: $\psi_{klm}(\vec r) = R_{kl}(r) Y_{lm}(\theta,\varphi) \quad R_{kl}=\frac{\chi_{kl}(r)}{r}$

$$\int d^3r\, \psi^*_{klm}(\vec r)\, \psi_{k'l'm'}(\vec r) = \delta_{ll'}\delta_{mm'}\delta(k-k')$$

Подставим нашу ф-ию

$$\int d\Omega\, Y^*_{lm}(\theta,\varphi)\, Y_{l'm'}(\theta,\varphi) = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

$$\int_0^\infty dr\, r^2 R^*_{kl}(r) R_{k'l}(r) = \delta_{ll'}\delta(k-k')$$

$$\int_0^\infty dr\, r^2 R^*_{El}(r) R_{E'l'}(r) = \delta_{ll'}\delta(E-E')$$

$$\delta[\varphi(f')-\varphi(f)] = \frac{1}{\left|\frac{\partial\varphi(f)}{\partial f}\right|}\delta(f'-f)$$

$$E=\frac{\hbar^2k^2}{2\mu} \qquad \frac{dE}{dk}=\frac{\hbar^2 k}{\mu} \Rightarrow R_{El}(r)=\sqrt{\frac{dk}{dE}}R_{kl}(r)=$$

$$= R_{El} = \sqrt{\frac{\mu}{\hbar^2 k}} R_{kl}$$

При $l=0$ $$\frac{d^2\chi_{k0}(r)}{dr^2}+k^2\chi_{k0}(r)=0$$

$$\chi_{k0}(r)=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\sin kr.$$

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

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

Перейдем к безразмерной величине:

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

Решения: две независимых → сфер. функц Бесселя, Неймана

$$R_{kl}(kr)=C_1 j_l(kr)+C_2 n_l(kr)$$

Тогда функция: $\psi_{klm}(\vec{r})=[C_1 j_l(kr)+C_2 n_l(kr)]\,Y_{lm}(\theta,\varphi)$

При $U\neq 0$ появляется фазовый сдвиг в синусе → δ_l

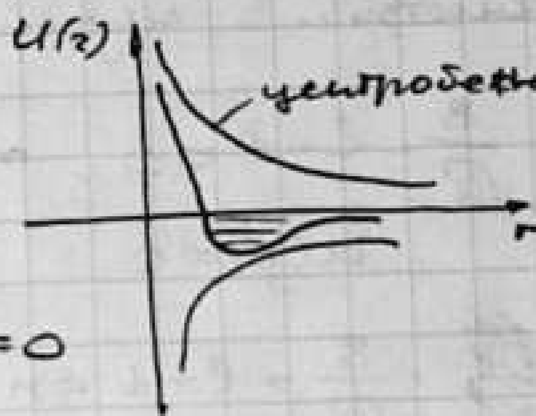
Движение в кулоновском поле для $E<0$

Фактически $\to$ задача об атоме водорода

Рассматриваем движение зар. частицы $-e^-$

в эл. поле ядра

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r}$$



Запишем ур-е для рад. ф-ии.

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

Обозначим: $A = -\frac{2\mu E}{\hbar^2} > 0$ $\quad B = \frac{\mu Z e^2}{\hbar^2} > 0$

Делаем замену $\rho = 2\sqrt{A}\, r$

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

При $\rho \to 0$ $\quad R''(\rho) + \frac{2}{\rho}R'(\rho) - \frac{l(l+1)}{\rho^2}R(\rho) = 0 \Rightarrow R(\rho) \sim \rho^l$

$\rho \to \infty$ $\quad R''(\rho) - \frac{1}{4}R(\rho) = 0 \Rightarrow R(\rho) \sim e^{-\rho/2}$

Тогда ищем решение в виде.

$$R(\rho) = \rho^l e^{-\rho/2} u(\rho)$$

$$R' = l\rho^{l-1}e^{-\rho/2}u - \frac{1}{2}\rho^l e^{-\rho/2}u + \rho^l e^{-\rho/2}u'(\rho)$$

$$R'' = [l(l-1)\rho^{l-2}u - \frac{1}{2}l\rho^{l-1}u + l\rho^{l-1}u' - \frac{1}{2}l\rho^{l-1}u +$$

$$+ \frac{1}{4}\rho^l u - \frac{1}{2}\rho^l u' + l\rho^{l-1}u' - \frac{1}{2}\rho^l u' + \rho^l u''] e^{-\rho/2} =$$

$$-[\rho^l u'' - \rho^l u' + 2l\rho^{l-1}u' + \frac{1}{4}\rho^l u - l\rho^{l-1}u + l(l-1)\rho^{l-2}u]e^{-\rho/2}$$

$$\rho^2 u'' + (2l+2-\rho)\rho u' + \left[\frac{B}{\sqrt{A}}\frac{\rho^2}{\rho} - \cancel{\frac{1}{4}\rho^2} - \cancel{l(l+1)} + \cancel{2l} - \rho + \cancel{\frac{1}{4}\rho^2} -\right.$$

$$\left. - l\rho + \cancel{l(l-1)}\right]u = 0$$

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

Рассмотрим случай:

$\frac{B}{\sqrt{A}} - l - 1 = 0$, тогда $\rho u'' + (2l+2-\rho)u' = 0$

$u(\rho) = C$

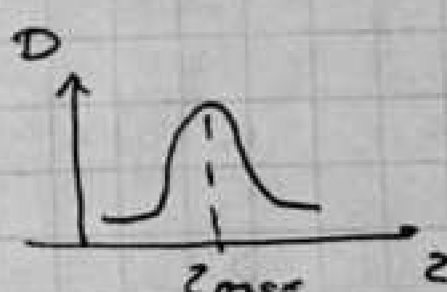
$\frac{B}{\sqrt{A}} = l + 1 = n$ — гл. кв. число

$l = 0, 1, 2 \ldots$ $n = 1, 2 \ldots$

$$B^2 = An^2 \Rightarrow -\frac{2\mu E_n}{\hbar^2} = \frac{\mu^2 Z^2 e^4}{\hbar^2 \hbar^4} \Rightarrow E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2}$$

$R_{nl}(\rho) = C\rho^l e^{-\rho/2}$ $\int_0^\infty dr\, r^2 R_{nl}^2(r) = 1$

распр. плотн. вероятн. рад. $D(r) = r^2 R_{nl}^2(r) \sim r^{2l+2} e^{-\alpha r}$



$\rho_{max} = 2n$, — круговые орбиты

$r_{max} = \frac{\rho_{max}}{2\sqrt{A}} = \frac{n^2}{Z} a_0$

$a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ — радиус 1-й боровской орбиты

Волн. ф-ия осн. сост. водорода $Z = 1$; $n = 1$; $l = 0$; $m = 0$

$$\psi_{1,0,0}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

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

имеет решение называемое вырожденная гипергеометрическая функция. При $\rho \to 0$ $F = 1$

$|\rho| \to \infty$ $\sim e^{\rho}$, что нефизично

Нужно $\frac{B}{\sqrt{A}} = \underbrace{n_r}_{\text{рад. кв. число}} + \ell + 1 = n$

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

Энергия имеет вырождение по ℓ

Берем 2 эрмитовских оператора, коммутирующих с Гамильтонианом, но не коммутирующих между собой: $\hat{f} = \hat{f}^+$, $\hat{g} = \hat{g}^+$, $[\hat{f}, \hat{H}] = 0$; $[\hat{g}, \hat{H}] = 0$

$[\hat{f}, \hat{g}] \neq 0$ $\to$ операторы не могут иметь совместных собств ф-ий.

$\hat{H}\psi = E\psi$:

$\hat{H}(\hat{g}\psi) = \hat{g}(\hat{H}\psi) = \hat{g}(E\psi)$ т.е ф-ия $\hat{g}\psi$ тоже собственная ф-ия гамил. с собств знач E.

т.к $\hat{g}\psi \neq c\hat{\psi}$, то сост с E отвечают как минимум 2 различные собств ф-ии ψ и $\hat{g}\psi$ $\to$ ~~сост~~ состояние вырождено

Существует оператор эксцентриситета или оператор Рунге-Ленца. $\hat{\mathcal{E}}$ ~~$\mathcal{E}$~~ $\to [\hat{\mathcal{E}}, \hat{H}] = 0$, но $[\hat{\mathcal{E}}, \hat{\vec{\ell}}^2] \neq 0$

В класс. мех. $\ell = \frac{1}{\mu Z e^2}[\underbrace{\vec{M}}_{\text{класс мом.имп.} \to \hat{\vec{\ell}}} \times \vec{P}] + \frac{\vec{r}}{r}$

$$\hat{\vec{\mathcal{E}}} = \frac{\hbar}{2\mu Z e^2}\left\{[\hat{\vec{\ell}} \times \hat{\vec{P}}] - [\hat{\vec{P}} \times \hat{\vec{\ell}}]\right\} + \frac{\vec{r}}{r} \Rightarrow \text{вырождение по } \ell$$

$[\hat{\mathcal{E}}_i, \hat{\mathcal{E}}_j] \neq 0.$

В общем случае состояние атома водорода с E_n (кроме $\overset{\text{осн сост}}{n=1}$) не имеет определенной четности.

$$\psi_n(r) = \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^{l} C_{lm} \psi_{nlm}(r)$$

где $\psi_{nlm}(r) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$, т.е

$\psi_n(r)$ – суперпозиция ф-ий с разными значениями l, а четность сост определяется $P(l) = (-1)^l$

=> состояние атома водорода не имеет опред чет.

Различные представления вектора состояния

Кв. мех основывается на описании состояний кв. системы с помощью волн. ф. $\psi_a(q)$

q - набор координат или других переменных - индекс представления.

a - индекс состояния - содержит набор значений физ величин или кв чисел.

Дирак предложил записывать в. ф в таком виде:

$$\psi_a(q) = \langle q | a \rangle$$

$\Rightarrow$ бравектор $\langle q|$

кетвектор $|a\rangle$

$$\langle a|^{+} = |a\rangle \quad ; \quad |a\rangle^{+} = \langle a|$$

Бравекторы и кетвекторы принадлежат к разным сопряженным пространствам: $H: |a\rangle$; $\dot{H}^{*}: \langle a|$ изоморфно (можно поставить соответствие).

Дискр спектр → сепар. гильберт. простр

1) линейное пространство (векторное)
2) определено скалярное произведение
3) полное нормированное пространство
4) $\exists$ ортонорм базис по которому можно разложить $|a\rangle = \sum_F |F\rangle\langle F|a\rangle$

Эрмитовские операторы действуют на кет-вектор слева направо, на бравектор → справа налево

Совокупность коэф $\langle f_n|a\rangle$ разлож вект сост по собств векторам $|f_n\rangle$ оператора $\hat{f}$ наз-ся волн ф-цией сост $|a\rangle$ в f изобр предст.

$$|b\rangle = \hat{F}|a\rangle$$

$$\langle b| = |b\rangle^{+} = (\hat{F}|a\rangle)^{+} = \langle a|\hat{F}^{+} = \langle a|\hat{F}$$

Векторы состояний удовл. нормир условию

$\langle a_i | a_j \rangle = \delta_{ij}$ ← дискретный спектр

$\langle a_i | a_j \rangle = \delta(a_i - a_j)$

из разлож. Условие полноты: $\sum\limits_n |f_n\rangle\langle f_n| = 1$ (дискр)

Для непрер. спектра

$$|a\rangle = \int dq |q\rangle\langle q|a\rangle$$

усл. полн: $\int |q\rangle dq \langle q| \equiv \int dq |q\rangle\langle q| = 1$

Сделаем переход к энергет. представлению

Рассмотрим ортонорм. базис, сост из собств ф-ций $\hat{H}$

В коорд предст: $\hat{H}\psi_{E_n}(q) = E_n \psi_{E_n}(q)$

$\Rightarrow \psi_{E_n}(q) = \langle q|E_n\rangle$

$$\int dq \langle E_m|q\rangle\langle q|E_n\rangle \equiv \langle E_m|E_n\rangle =$$

$= \delta_{mn}$ ← дискр

$\delta(E_m - E_n)$ ← непр. спектр.

Импульсное представление.

$$\psi_{\vec{p}}(q) = \langle q|\vec{p}\rangle$$

Нормировка: $\int dq \psi^*_{\vec{p}}(q)\psi_{\vec{p}'}(q) = \int dq \langle\vec{p}|\underbrace{q\rangle\langle q}_{\equiv 1}|\vec{p}'\rangle =$

$= \langle\vec{p}|\vec{p}'\rangle = \delta(\vec{p} - \vec{p}')$

Т.е можно перейти к любому

представлению

$|a\rangle \to \langle q|a\rangle$ – коорд

$\langle E_n|a\rangle$ – энерг

$\langle \bar{p}|a\rangle$ – импульсн.

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \langle \vec{r}|\vec{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i\bar{p}\bar{r}}{\hbar}}$$ ← собств ф-я оператора импульса в коорд представлении

$$\langle \bar{p}|\bar{r}\rangle = \psi^{*}_{\bar{p}}(\bar{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-\frac{i\bar{p}\bar{r}}{\hbar}}$$ ← собств ф-я оператора коорд в импульсн представлении

Различные представления операторов.

Запишем оператор преобразования одного вектора состояния в другой. (проекционный оп)

$\hat{G} = |b\rangle\langle a| \qquad \hat{G}|c\rangle = |b\rangle\langle a|c\rangle$

Можно разложить по полн. системе операторов

$|f_m\rangle\langle f_n|$

$$\hat{g} = \sum_{m,n} \overset{\text{коэфф. разлож}}{g_{mn}} |f_m\rangle\langle f_n|$$

Домножим слева на $\langle f_i|$, справа на $|f_k\rangle$

$$\Rightarrow \quad g_{ik} = \langle f_i|\hat{g}|f_k\rangle = \sum_n\sum_m g_{nm}\langle f_i|f_m\rangle\langle f_n|f_k\rangle = g_{ik}$$

g_{ik} - матр элемент оператора $\hat{g}$ в f-представл.

в энергет предст: $g_{ik} = \langle E_i|\hat{g}|E_k\rangle$

Получим оператор координаты в импульсном представлении

$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial r}$ ← опер имп в коорд предст.

$\langle \vec{r}|\vec{p}\rangle$ ← собств ф-ии опер имп в коорд предст

$$\hat{\vec{p}}\langle \vec{r}|\vec{p}\rangle = \langle \vec{r}|\hat{\vec{p}}|\vec{p}\rangle = \{\hat{\vec{p}}|\vec{p}\rangle = \vec{p}|\vec{p}\rangle\} = \vec{p}\langle \vec{r}|\vec{p}\rangle$$

Вычислим матричный элемент $\langle \vec{p}|\hat{\vec{p}}|\vec{p}\rangle =$

$$= \int d^3r \langle \vec{p}'|\vec{r}\rangle\langle \vec{r}|\hat{\vec{p}}|\vec{p}\rangle = \int d^3r \langle \vec{p}'|\vec{r}\rangle\langle \vec{r}|\vec{p}\rangle\vec{p} =$$

$$= \vec{p}\,\delta(\vec{p}' - \vec{p})$$ — диаг. матр. элемент

Переходим к оп. коорд.

$$\langle \vec{p}' | \hat{\vec{r}} | \vec{p} \rangle$$

$$\hat{\vec{r}} | \vec{r} \rangle = \vec{r} | \vec{r} \rangle.$$

$$\Rightarrow \langle \vec{p}' | \hat{\vec{r}} | \vec{p} \rangle = \int d^3r \langle \vec{p}' | \hat{\vec{r}} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = \int d^3r\, \vec{r} \langle \vec{p}' | \vec{r} \rangle \times$$

$$\times \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = \left\{ \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}} \right\} =$$

$$= \left\{ \vec{r} \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \right\} =$$

$$= -i\hbar \int d^3r \langle \vec{p}' | \vec{r} \rangle \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle =$$

$$= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \int d^3r \langle \vec{p}' | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \delta(\vec{p}' - \vec{p})$$

$$\langle \vec{p} | \hat{\vec{r}} | a \rangle = \int d^3p' \langle \vec{p} | \hat{\vec{r}} | \vec{p}' \rangle \langle \vec{p}' | a \rangle =$$

$$= \int d^3p' \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \delta(\vec{p} - \vec{p}') \right] \langle p' | a \rangle = \text{по частям}$$

$$= i\hbar \int d^3p'\, \delta(\vec{p} - \vec{p}') \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \langle \vec{p}' | a \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \langle \vec{p} | a \rangle =$$

$$= \langle \vec{p} | i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{p}} | a \rangle \quad \Rightarrow \hat{\vec{r}} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{p}}$$

оператор коорд в импульсном ~~изображении~~ представлении.

Оператор Гамильтона

в коорд представлении $\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{\vec{p}}^2 + U(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}^2} + U(\vec{r})$

в имп. представлении $\hat{H} = \frac{1}{2} \vec{p}^2 + U(i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{p}})$

Матр. элемент: $\langle \vec{p}' | \hat{H} | \vec{p} \rangle = \frac{1}{2m} \vec{p}^2 \delta(\vec{p}' - \vec{p}) +$

$$+ U\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \delta(\vec{p}' - \vec{p})\right)$$

Канонические преобразования

– переход от одних координат к другим.

Переход от энерг. предст к координатному:

$$\langle q|a\rangle = \hat{S}\langle E_n|a\rangle = \sum_n \langle q|E_n\rangle\langle E_n|a\rangle$$

Этому оператору соотв ядро $\hat{S} \to \langle q|E_n\rangle$

Переход от импульсн предст к коорд.

$$\langle q|B\rangle = \hat{T}\langle \vec{p}|B\rangle = \int d^3p \langle q|\vec{p}\rangle\langle \vec{p}|B\rangle$$

$\Rightarrow$ оператору $\hat{T}$ соотв ядр $\langle q|\vec{p}\rangle$

Обратное преобразование

$$\langle E_n|a\rangle = \hat{S}^{-1}\langle q|a\rangle = \int dq \langle E_n|q\rangle\langle q|a\rangle$$

$\Rightarrow$ оператору $\hat{S}^{-1}$ соотв ядро $\langle E_n|q\rangle =$

$= \langle q|E_n\rangle^+ \Rightarrow \hat{S}^+$

$$\langle \vec{p}|B\rangle = \hat{T}^{-1}\langle q|B\rangle = \int dq \langle \vec{p}|q\rangle\langle q|B\rangle$$

$$\hat{T}^{-1} \to \langle \vec{p}|q\rangle = \langle q|\vec{p}\rangle^+ \Rightarrow \hat{T}^+$$

$\Rightarrow$ операторы должны удовл условиям

$\hat{S}^{-1} = \hat{S}^+$, $\hat{T}^{-1} = \hat{T}^+$ $\Rightarrow$ это условие унитарности.

Пусть есть унитарный оператор $\hat{S}^+\hat{S}=1$ и

пусть он осущ преобр $\langle \chi|a\rangle = \hat{S}\langle \varrho|a\rangle$ и пусть

он же осущ преобр $\langle \varphi|a\rangle = \hat{S}\langle \eta|a\rangle$

$\langle \eta|a\rangle = \hat{F}_\varrho \langle \varrho|a\rangle$

$\langle \varphi|a\rangle = \hat{S}\langle \eta|a\rangle = \{$вставим единицу $\hat{S}^{-1}S\} =$

$= \hat{S}\hat{F}_\varrho \hat{S}^{-1}\hat{S} = (\hat{S}\hat{F}_\varrho \hat{S}^{-1})\hat{S}\langle \varrho|a\rangle =$

$= \hat{S}\hat{F}_\varrho \hat{S}^{-1}\langle \chi|a\rangle$

$\hat{S}\hat{F}_\varrho \hat{S}^{-1}$ осущ переход от φ в χ-представлении

$\hat{F}_\chi = \hat{S}\hat{F}_\varphi \hat{S}^{-1}$; $\hat{F}_\varrho = \hat{S}^{-1}\hat{F}_\chi \hat{S}$

При канонич преобразованиях не меняются коммут

соотношен. => не мен спектры, матр элем и т.д.

Шредингеровское представление

Операторы физ. величин явно не зависят от времени, а изменение состояний - эволюция системы определяется изменением волн. ф-ии, которая содержит явную зависимость от времени => зависимость волн ф-ии от времени определяется волновым уравнением

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

Зависимость волн. ф-ии от времени можно описать с помощью оператора эволюции

$$\psi(t) = \hat{R}(t, t_0)\psi(t_0), \quad \hat{R}(t_0, t_0) = 1.$$

Из условия нормировки:

$\langle \psi_s(t) | \psi_s(t) \rangle = \langle \psi_s(t_0) | \psi_s(t_0) \rangle$, получаем, что

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \hat{R}(t,t_0)\psi(t_0) | \hat{R}(t,t_0)\psi(t_0) \rangle =$$

$$= \langle \psi(t_0) | \underbrace{\hat{R}^+(t,t_0)\hat{R}(t,t_0)}_{1} | \psi(t_0) \rangle = \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle$$

$\hat{R}^+\hat{R} = 1 \Rightarrow \hat{R}$ - унитарный

Подставим в ур-е Шр.

$$i\hbar \frac{\partial \hat{R}(t,t_0)}{\partial t}\psi(t_0) = \hat{H}\hat{R}(t,t_0)\psi(t_0)$$

$$i\hbar \frac{\partial \hat{R}(t,t_0)}{\partial t} = \hat{H}\hat{R}(t,t_0)$$

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

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

Гайзенберговское представление

Волновые функции не изменяются с течением времени, а операторы физ величин явно зависят от времени.

Определим в.ф. так чтобы она равнялась такой же в Шр. предст в t_0.

$$\psi_H = \psi_S(t_0)$$

$$\psi_H = \hat{R}^{-1}(t, t_0)\psi_S(t)$$

При этом $\hat{Q}_H(t) = \hat{R}^{-1}(t, t_0)\hat{Q}_S\hat{R}(t, t_0)$ – связь операторов.

Продиф по t и домножим на $i\hbar$

$$i\hbar\frac{d\hat{Q}_H(t)}{dt} = i\hbar\left[\frac{\partial\hat{R}^{-1}}{\partial t}\hat{Q}_S\hat{R} + \hat{R}^{-1}\hat{Q}_S\frac{\partial\hat{R}}{\partial t}\right]$$

т.к $\frac{d}{dt}(\hat{R}^{-1}\hat{R}) = 0$, то $\frac{\partial\hat{R}^{-1}}{\partial t} = -\hat{R}^{-1}\frac{\partial\hat{R}}{\partial t}\hat{R}^{-1}$

Ур. Ш: $i\hbar\frac{\partial\hat{R}}{\partial t} = \hat{H}\hat{R} \Rightarrow \frac{\partial\hat{R}^{-1}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\hat{R}^{-1}\hat{H}$

Подставим.

$$i\hbar\frac{\partial\hat{Q}_H(t)}{\partial t} = \hat{R}^{-1}[\hat{Q}_S, \hat{H}]\hat{R}$$

т.к $\hat{R}^{-1}\hat{H}\hat{R} = \hat{H}$, то.

получим ур-е Гайзенберга $i\hbar\frac{d\hat{Q}_H(t)}{dt} = [\hat{Q}_H(t), \hat{H}]$

Представление взаимодействия.

Пусть имеется система состоящая из нескольких взаимодействующих частей.

Тогда ее Гамильтониан $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$
без взаим. опер. взаим.

волновая ф-я Ψ_I – interaction

$$\Psi_I(t) = \hat{R}_0^{-1}(t,t_0)\Psi_S(t) \quad \left| i\hbar \frac{\partial R_0(t,t_0)}{\partial t} = \hat{H}_0 \hat{R}_0(t,t_0) \right\} \Rightarrow$$

$$\hat{R}_0(t,t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}_0\right]$$

продиф по t и домножим на $i\hbar$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_I(t)}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial \hat{R}_0^{-1}}{\partial t}\Psi_S(t) + i\hbar \hat{R}_0^{-1}\frac{\partial \Psi_S(t)}{\partial t}$$

$$\frac{d}{dt}\left(\hat{R}_0^{-1}\hat{R}_0\right) = \frac{\partial R_0^{-1}}{\partial t}\hat{R}_0 + \hat{R}_0^{-1}\frac{\partial \hat{R}_0}{\partial t} = \frac{\partial \hat{R}_0^{-1}}{\partial t}\hat{R}_0 + \hat{R}_0^{-1}\hat{H}_0\hat{R}_0 = 0$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial \hat{R}_0^{-1}}{\partial t}\hat{R}_0 = -\hat{R}_0^{-1}\hat{H}_0\hat{R}_0$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_I(t)}{\partial t} = \cancel{-(\hat{R}_0^{-1}\hat{H}_0\hat{R}_0)\hat{R}_0^{-1}\Psi_S(t)} + \cancel{(\hat{R}_0^{-1}\hat{H}_0\hat{R}_0)\hat{R}_0^{-1}\Psi_S(t)} +$$

$$+ (\hat{R}_0^{-1}\hat{V}\hat{R}_0)\underbrace{\hat{R}_0^{-1}\Psi_S(t)}_{\Psi_I(t)} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial \Psi_I(t)}{\partial t} = V_I(t)\Psi_I(t)$$

$\Rightarrow$ Взаимодействие $\hat{V}_I = \hat{R}_0^{-1}\hat{V}\hat{R}_0$

Для любого оператора $\hat{Q}_I(t) = \hat{R}_0^{-1}(t,t_0)\hat{Q}_S\hat{R}_0(t,t_0)$

$\Rightarrow$ ур. е Шр: $i\hbar \frac{\partial \hat{Q}_I(t)}{\partial t} = [\hat{Q}_I(t), \hat{H}_0]$

Представление чисел заполнения для гармон. осциллятора.

Энергия стац. ур-ей осциллятора $E_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})$

=> каждый колеб квант имеет энергию $\hbar\omega$ и называется фононом. Возбужд. сост с $n=1$ – однофононными, $n=2$ -> двухфононные и т.д

Действие операторов $\hat{a}, \hat{a}^+$ на вектор $|n\rangle$,

где n – количество фононов

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$$ -> опер. уничтожени фононов

$$\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$$ -> опер. рожд фононов

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

$$\hat{a} = |n-1\rangle\sqrt{n}\langle n| \qquad \hat{a}^+ = |n+1\rangle\sqrt{n+1}\langle n|.$$

Введем оператор $\hat{n} = \hat{a}^+\hat{a}$ – оператор числа фононов

$$\hat{n}|n\rangle = \hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = n|n\rangle$$

Гамильтониан: $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}) = \hbar\omega(\hat{n}+\frac{1}{2})$

$$\langle n|\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega(n+1/2)$$ – энерг. осц.

Вакуумное состояние: $|0\rangle$.

$$\hat{a}|0\rangle\, 0, \quad E_0 = \langle 0|\hat{H}|0\rangle = \frac{\hbar\omega}{2},$$

Можно построить вектор состояния

с n фононами:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^n |0\rangle$$

Отличные от 0 матр. элементы

$$(\hat{a})_{n-1,n} = \langle n-1 | \hat{a} | n \rangle = \sqrt{n}$$

$$(\hat{a}^+)_{n+1,n} = \langle n+1 | a^+ | n \rangle = \sqrt{n+1}$$

$$\hat{a} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \quad \hat{a}^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdot \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}$$

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \ldots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \qquad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Возмущения, не зависящие от времени

Рассматриваем Гамильтониан $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$

где $\hat{H}_0$ – невозмущ. гамильтониан, имеем точное решение

$\hat{V}$ – возмущение, малая добавка,

явно от времени не зависит.

Нам известно точное решение $\hat{H}_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}$

Надо найти: $\hat{H}\psi_n = (\hat{H}_0 + \hat{V})\psi_n = E_n \psi_n$

Будем искать в.ф и энергию в виде ряд. в ряды:

$$\psi_n = \sum_{m=0}^{+\infty} \psi_n^{(m)} \; ; \; E_n = \sum_{m=0}^{+\infty} E_n^{(m)}$$

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)} \; ; \; E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)}$$

т.к $\psi_n^{(0)}$ – собств ф-ии эрмит оператора, то

они образуют ортонормир базис

$$\psi_n^{(1)} = \sum_m C_{mn}^{(1)} \psi_m^{(0)}$$

Подставим в ур.е Шр: и исключ гл II порядка $\hat{V}\psi_n^{(1)}, E_n^{(1)}\psi_n^{(1)}$..

$$\cancel{\hat{H}_0 \psi_n^{(0)}} + \hat{H}_0 \psi_n^{(1)} + \hat{V}\psi_n^{(0)} = \cancel{E_n^{(0)}} \psi + E_n^{(0)} \psi_n^{(1)} + E_n^{(1)} \psi_n^{(0)}$$

$$\int dv\, \psi_n^{(0)*} \Big\} \sum_m C_{mn}^{(1)} E_m^{(0)} \psi_m^{(0)} + \hat{V}\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \sum_m C_{mn}^{(1)} \psi_m^{(0)} + E_n^{(1)} \psi_n^{(0)} \quad \#$$

$$\int dq\, \psi_n^{(0)} \psi_m^{(0)} = \delta_{mn} \quad \Rightarrow \quad \cancel{C_{nn}^{(1)} E_n^{(0)}} + V_{nn} = E_n^{(0)} C_{nn}^{(1)} + E_n^{(1)}$$

$$V_{nn} = \int dq\, \psi_n^{(0)*} \hat{V} \psi_n^{(0)} \qquad \Rightarrow V_{nn} = E_n^{(1)}$$

ур (#) домножим на $\psi_k^{(0)*}$ $(k \neq n)$

$$\Rightarrow C_{kn}^{(1)} E_k^{(0)} + V_{kn} = E_n^{(0)} C_{kn}^{(1)}$$

$$C_{kn}^{(1)} = \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad k \neq n. \qquad V_{kn} = \int dq\, \psi_k^{(0)*} \hat{V} \psi_n^{(0)}$$

$$\Rightarrow \psi_n^{(1)} = \sum_m \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)} \qquad m \neq n.$$

Ищем $C_{nn}^{(1)}$:

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + C_{nn}^{(1)} \psi_n^{(0)} + \sum_{m}^{m \neq n} \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)}$$

Нормируем: $\int dq\, \psi_n^* \psi_n =$

$$= \int dq \left(\psi_n^{(0)*} + C_{nn}^{(1)*} \psi_n^{(0)*} + \sum_m \frac{V_{mn}^* \psi_m^{(0)*}}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})} \right) \times$$

$$\times \left(\psi_n^{(0)} + C_{nn}^{(1)} \psi_n^{(0)} + \sum_m \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)} \right) =$$

$$= 1 + [\underbrace{C_{nn}^{(1)} + C_{nn}^{(1)*}}_{= 2\,\mathrm{Re}\, C_{nn}^{(1)}}] = 1.$$

$$\Rightarrow \mathrm{Re}\, C_{nn}^{(1)} = 0$$

а т.к $\hat{V}$ - эрмитов, то $\mathrm{Im}\, C_{nn}^{(1)} = 0.$

(диаг эл-ты действ числа)

Критерий применимости:

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

необх условие сходимости ряда.

$$\left| \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \right| \ll 1 \Rightarrow |V_{mn}| \ll |E_n^{(0)} - E_m^{(0)}|$$

Т.е матричные элементы от возмущения должны быть малы по сравнению с расстояниями между уровнями невозмущ. энергии

Вторая поправка находится аналогично:

$$E_n^{(2)} = \sum_m \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} < 0 \qquad m \neq n$$

индекс вырожд

Умножим слева величину $[E_n^{(1)} - \hat{V}]\varphi_{ni}^{(0)}$ на $\varphi_{nk}^{(0)*}$ и $\int$

крат вырожд

$$\sum_{j=1}^{s} \left[\int dq\, \varphi_{nk}^{(0)*} \hat{V} \varphi_{nj}^{(0)} - E_n^{(1)} \delta_{kj} \right] b_{ij} = 0$$

$$\left\{ \varphi_{ni}^{(0)} = \sum_{j=1}^{s} b_{ij} \varphi_{nj}^{(0)} \right.$$

$$\Rightarrow \sum_{j=1}^{s} [V_{kj} - E_n^{(1)} \delta_{kj}] b_{ij} = 0$$

$$\text{где} \quad V_{kj} = \int dq\, \varphi_{nk}^{(0)*} \hat{V} \varphi_{nj}^{(0)}$$

Получили систему линейных однородных алгебраических уравнений, нетривиальное решение если $\det(V_{kj} - E_n^{(1)} \delta_{kj}) = 0$

$$\begin{vmatrix} V_{11} - E_n^{(1)} & V_{12} & \ldots \\ V_{21} & V_{22} - E_n^{(1)} & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots \end{vmatrix} = 0$$

→ это секулярное уравнение

Если все подуровни разные, то вырождение снимается полностью, не все - частично.

размер $S \times S$

Возмущения, зависящие от времени

Гамильтониан $\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$ явно зависит от времени, т.е не существует стац. состояний системы, а энергия не сохраняется

$$i\hbar \frac{\partial \psi_n(t)}{\partial t} = [\hat{H}_0 + \hat{V}(t)]\psi_n(t)$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi_n^{(0)}(t)}{\partial t} = \hat{H}_0 \psi_n^{(0)}(t) \rightarrow \psi_n^{(0)}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n^{(0)} t} \varphi_n^{(0)}(t)$$

$$\psi_n(t) = \psi_n^{(0)}(t) + \psi_n^{(1)}(t)$$

Разложим $\psi_n'(t)$ по полн набору ф-ий $\psi_n^{(0)}(t)$

$$\psi_n^{(1)}(t) = \sum_k a_{kn}^{(1)}(t)\psi_k^{(0)}(t)$$

Подставим:

$$\cancel{i\hbar \frac{\partial \psi^{(0)}(t)}{\partial t}} + \cancel{i\hbar \sum_k a_{kn}^{(1)}(t) \frac{\partial \psi_k^{(0)}(t)}{\partial t}} + \underline{i\hbar \sum_k \frac{d a_{kn}^{(1)}(t)}{dt} \psi_k^{(0)}(t)} =$$

$$= \cancel{\hat{H}_0 \psi_n^{(0)}(t)} + \underline{\hat{V}(t)\psi_n^{(0)}} + \cancel{\sum_k \hat{a}_{kn}^{(1)}(t) \hat{H}_0 \psi_k^{(0)}(t)}$$

Слева умножим на $\psi_m^{(0)*}$ и $\int$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{d a_{mn}^{(1)}}{dt} = V_{mn}(t), \text{ где} \qquad \omega_{mn} = \frac{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}{\hbar}$$

$$V_{mn}(t) = \int dq\, \psi_m^{(0)*} \hat{V}(t) \psi_n^{(0)} = \tilde{V}_{mn}(t) e^{i\omega_{mn} t}$$

$$\hat{V}_{mn}(t) = \int dq\, \varphi_m^{(0)}(t) \hat{V}(t) \varphi_n^{(0)}(t)$$

$$\Rightarrow a_{mn}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int dt\, V_{mn}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int dt\, e^{i\omega_{mn} t}\tilde{V}_{mn}(t)$$

Периодическое возмущение:

$$\hat{V}(t) = \hat{F} e^{-i\omega t} + \hat{G} e^{i\omega t}$$

эрмитов

$$\hat{V} = \hat{V}^+ \Rightarrow \hat{G} = \hat{F}^+, \quad G_{mn} = F^*_{nm}$$

$$V_{mn}(t) = \hat{V}_{mn}(t) e^{i\omega_{mn} t} = F_{mn} e^{i(\omega_{mn} - \omega)t} + F^*_{nm} e^{i(\omega_{mn} + \omega)t}$$

$$a^{(1)}_{mn}(t) = -\frac{\cancel{i}}{\hbar} \left\{ \frac{F_{mn} e^{i(\omega_{mn} - \omega)t}}{\cancel{i}(\omega_{mn} - \omega)} + \frac{F^* e^{i(\omega_{mn} + \omega)t}}{(\omega_{mn} + \omega)} \right\}$$

$$|\Psi^{(1)}_n| << |\Psi^{(0)}_n| \Rightarrow \left\{ \omega_{mn} = \frac{E^{(0)}_m - E^{(0)}_n}{\hbar} \right\}$$

$$\Rightarrow |E^{(0)}_m - E^{(0)}_n \pm \hbar\omega| >> |F_{mn}|$$

Переходы в непрерывном спектре

Важной задачей теории возмущений явл. определение вероятности перехода в непрерывном спектре под действием незав от времени возб.

Рассмотрим адиабатическое возмущени

$$\hat{V}(t) = \hat{V} e^{\lambda t}, \quad \lambda > 0 \text{ и } \lambda \to 0 \quad t_0 = -\infty$$

$$V_{mn}(t) = \hat{V}_{mn} e^{i(\omega_{mn} + \lambda)t}$$

$$a^{(1)}_{mn}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt\, \hat{V}_{mn}(t) = -\frac{\tilde{V}_{mn} e^{(i\omega_{mn} + \lambda t)}}{\hbar(\omega_{mn} + \frac{\lambda}{i})} =$$

$$= -\frac{\tilde{V}_{mn} e^{(i\omega_{mn} + \lambda)t}}{\hbar(\omega_{mn} - i\lambda)}$$

Вероятность перехода в един времени определяется квадратом модуля $|a^{(1)}_{mn}(t)|^2$

$$|a^{(1)}_{mn}(t)|^2 = \frac{|\hat{V}_{mn}|^2 e^{2\lambda t}}{\hbar^2(\omega_{mn}^2 + \lambda^2)}$$

$$\frac{d\omega_{mn}}{d\nu_m} = \lim_{\lambda\to 0}\frac{d}{dt}|a^{(1)}_{mn}(t)|^2 = \lim_{\lambda\to 0}\frac{d}{dt}\frac{|\tilde{V}_{mn}|^2 e^{2\lambda t}}{\hbar^2(\omega_{mn}^2 + \lambda^2)} =$$

$$= \lim_{\lambda\to 0}\frac{|\tilde{V}_{mn}|^2 e^{2\lambda t} 2\lambda}{\hbar^2(\omega^2 + \lambda^2)} = \left\{\lim_{\lambda\to 0}\frac{\lambda}{\omega_{mn}^2 + \lambda^2} = \pi\delta(\omega_{mn})\right\} =$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar^2}|\hat{V}_{mn}|^2\delta(\omega_{mn}) =$$

В непрерывном спектре всегда сост вырождены,

поэтому число сост в интервале

$(E_m, E_m + dE_m)$ равно $d\nu_m = \overset{\text{плотн сост}}{\rho}(E_m^{(0)})\, dE_m$

$$\Rightarrow ⊜ \frac{2\pi}{\hbar} |\hat{V}_{mn}|^2 \delta(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})$$

δ-ф-ия показывает, что вероятность отлична от 0 только при $m \neq n$, что есть закон сохранения энергии.

$$dw_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar} |\hat{V}_{mn}|^2 \delta(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})\, d\nu_m$$

Проинтегрируем:

$$w_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar} |\hat{V}_{mn}|^2 \rho(E_n^{(0)}) \text{ — Золотое правило Ферми.}$$

полн вероятность перехода в ед времени из сост n в сост m.

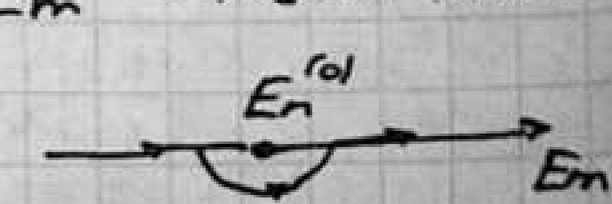
Волн. ф-ия $\psi_n = \psi_n^{(0)} + \int d\nu_m\, a_{mn}^{(1)}(t)\, \psi_m^{(0)} =$

$$= \psi_n^{(0)} + \int d\nu_m \left[-\frac{\hat{V}_{mn} e^{i\omega_{mn} t}}{\hbar \omega_{mn}} \right] \underbrace{\psi_m^{(0)}}_{= e^{-\frac{i}{\hbar} E_m^{(0)} t} \varphi_m^{(0)}} =$$

$$= \psi_n^{(0)} + \int d\nu_m \frac{\hat{V}_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \varphi_m^{(0)} =$$

$$= \left[\varphi_n^{(0)} + \int d\nu_m \frac{\hat{V}_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \varphi_m^{(0)} \right] e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)} t}.$$

В знаменателе стоит $E_n^{(0)} - E_m^{(0)}$ $\to$ есть полюс

$\Rightarrow$ сделаем добавку $i0$. $\Rightarrow$ 

$$\psi_n = \left[\psi_n^{(0)} + \int d\nu_m \frac{\tilde{V}_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)} + i0} \psi_m^{(0)} \right] e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)} t}.$$

Волновая функция в квазиклассическом приближении

$\psi = ce^{\frac{i}{\hbar}S}$ Если дебройлевская длина волны значительно меньше характерного линейного размера квантовой системы. $\lambda << R$, то можно делать переход к классической механике.

$$\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + [E - U(\bar{r})]\psi = 0$$

$$\Rightarrow \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 \frac{i\hbar}{2m}\Delta S = E - U$$

при $\hbar \to 0$ ур-е Г-Я

$\hbar$ - малый параметр, разложение в ряд S по ст. $\hbar$

$$S = S_0 + \frac{\hbar}{i}S_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_2 + \ldots$$

Рассматриваем одномерное движение.

$$\Rightarrow \frac{1}{2m} S_0'^2(x) = E - U(x)$$

$$\Rightarrow S_0(x) = \pm\int dx\sqrt{2m[E - U(x)]}$$

$$\sqrt{2m[E - U(x)]} - p(x) \quad \Rightarrow S_0(x) = \pm\int dx\, p(x)$$

Условия применимости:

$$\left|\frac{\hbar S_0''}{S_0'^2}\right| << 1 \quad \Rightarrow \left|\frac{d}{dx}\frac{\hbar}{S_0'}\right| << 1, \quad \text{т.к.} \left|\frac{\hbar}{S_0'}\right| = \lambda, \text{ то}$$

$$\frac{d\lambda}{dx} << 1.$$

Длина волны частицы должна мало меняться на расстояниях порядка её самой.

Перепишем в другом виде:

$$\frac{dp(x)}{dx} = \frac{d}{dx}\sqrt{2m[E-U(x)]} = \frac{\sqrt{2m}}{2\sqrt{E-U(x)}}\underbrace{\left(-\frac{dU(x)}{dx}\right)}_{\text{сила}} =$$

$$= \frac{m}{p}F(x)$$

$$\Rightarrow \frac{dp(x)}{dx} = \frac{m}{p}F(x)$$

$$\left|\frac{d}{dx}\frac{\hbar}{p}\right| \ll 1 \qquad \left|\frac{\hbar}{p^2}\frac{dp(x)}{dx}\right| \ll 1.$$

$$\Rightarrow \frac{m|F(x)|\hbar}{|p|^3} \ll 1$$ → условие применимости квазиклассического приближения

Т.е квазиклассика не применима при малом импульсе частицы → в области точки поворота

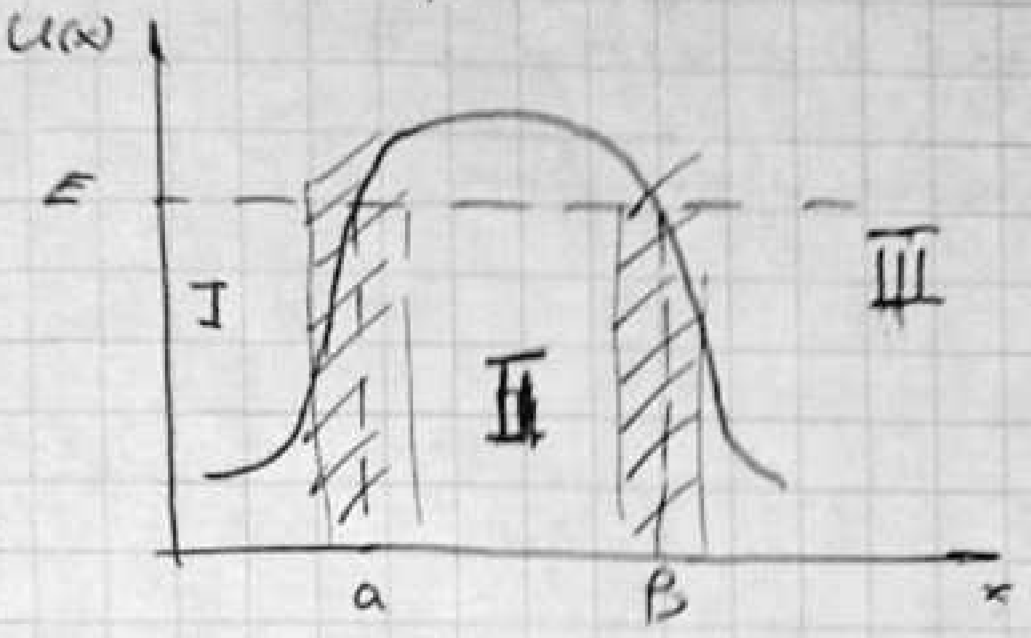
Получим следующий член разложения: $S_0' S_1' + \frac{1}{2} S_0'' = 0$

$$\Rightarrow S_1' = -\frac{S_0''}{2S_0'} = -\frac{p'}{2p}$$

проинтегрируем: $S_1(x) = -\frac{1}{2}\ln|p(x)| + \ln C' = \ln\frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} + \ln C'$

Получили квазиклассическую волновую функцию.

$$\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{p}} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int dx\, p(x)\right] + \frac{C_2}{\sqrt{p}} e^{-\frac{i}{\hbar}\int dx\, p(x)}$$



I, III — классически доступные области $E > U(x)$

II — классически недоступная области

$$p(x) = \sqrt{2m(E - U(x))}$$

При $E < U(x)$ импульс становится мнимым

$$\Rightarrow \psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{|p|}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int dx\,|p(x)|\right] + \frac{C_2}{\sqrt{|p|}} \exp\left[\frac{1}{\hbar}\int dx\,|p(x)|\right]$$

Рассмотрим переход I → II

Вблизи точки поворота можно разложить в ряд:

$$|E - U(x)| \approx |x - a|\,|F_0|, \text{ где } |F_0| = \left|\frac{dU(x)}{dx}\right|_{x=a}$$

радиус применимости

абсол. велич. силы

$$\Rightarrow |p(x)| \approx \sqrt{2m|x-a|\,|F_0|}$$

Из условия применимости получаем $|p| \gg (m\hbar|F_0|)^{1/3} = p_0$

$$\Rightarrow |p| \gg p_0 \;;$$

$$ƛ = \frac{\hbar}{p} \;; \quad ƛ_0 = \frac{\hbar}{p_0}$$

Подставим p: $\quad (2m|x-a|\,|F_0|)^{1/2} \gg (m\hbar|F_0|)^{1/3}$

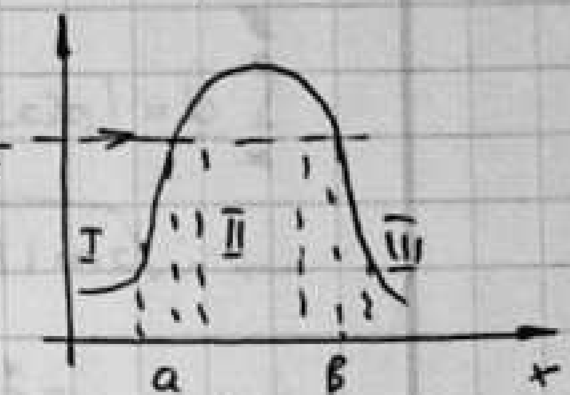
$$\Rightarrow |x-a| \gg \frac{m^{2/3}\hbar^{2/3}}{|F_0|^{1/3}2m} = \frac{m\hbar}{|F_0|^{1/3}2m\, m^{1/3}\hbar^{1/3}} = \frac{\hbar}{2p_0} = \frac{ƛ_0}{2} \sim ƛ$$

$$\Rightarrow |x-a| \gg ƛ$$

=> Можно пользоваться квазикласс. приближением возле точек поворота на расстояниях, на которых укладывается много длин волн

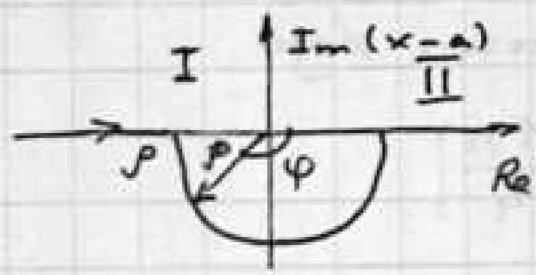
Прохождение через потенциальный барьер произвольн формы в квазикласс. приближении.

Условие применимости $\frac{m\hbar|F|}{|p|^3} \ll 1 \Rightarrow$ плавные барьеры.



$$x<a: \ \psi_I(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_x^a dx\, p(x) + \frac{i\pi}{4}\right]$$

Необходимо обойти точку поворота по комплексной области.



Приближаемся к a на расстояние $\rho = |x-a|$

Разложим: $E - U(x) \approx (a-x)|F_0|$, где $F_0 = -\left.\frac{dU(x)}{dx}\right|_{x=a}$

$$\Rightarrow \psi_1(x) = \frac{C}{[2m(a-x)|F_0|]^{1/4}} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_x^a dx\sqrt{2m(a-x)|F_0|} + \frac{i\pi}{4}\right]$$

$a - x = \rho e^{i\varphi} \quad -\pi \le \varphi \le 0.$ Делаем обход в нижней полуплоскости, т.к. вф должна экспоненц. затухать

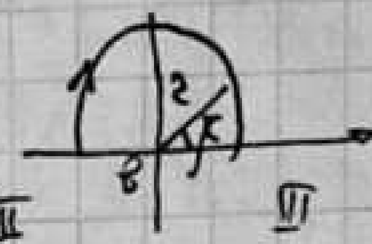
При $\varphi = -\pi \quad \sqrt{2m|F_0|}\int_x^a dx\sqrt{a-x} = \sqrt{2m|F_0|}\,\frac{2}{3}(a-x)^{3/2} =$

$$= \sqrt{2m|F_0|}\,\frac{2}{3}\rho^{3/2} e^{\frac{3i\varphi}{2}} \cdot e^{-\frac{3i\varphi}{2}} \to$$

$$-i\sqrt{2m|F_0|}\,\frac{2}{3}\rho^{3/2} = -i\int_a^x dx\sqrt{2m|F_0|(x-a)} \simeq -i\int_a^x dx\,|p(x)|$$

$$(a-x)^{-\frac{1}{4}} = \rho^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{i\varphi}{4}} e^{\frac{i\varphi}{4}} = \rho^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{i\varphi}{4}} e^{-\frac{i\pi}{4}} \to \rho^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{i\pi}{4}} = |x-a|^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{i\pi}{4}}$$

$$\Rightarrow \psi_{II} = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_a^x dx\,|p(x)|\right]$$

Сделаем обход точки B. 

$\pi \le \chi \le 0 \qquad z = |B-x|$

$B - x = z e^{i\chi} \qquad |p(x)| = \sqrt{2m|E-U(x)|} \approx \sqrt{2m|\tilde F_0|}\,(B-x)^{1/2}$

$$\tilde F_0 = -\frac{dU(x)}{dx}\Big|_{x=B}$$

$$\int_x^B dx\,|p(x)| \approx \sqrt{2m|F_0|}\,\frac{2}{3}(B-x)^{3/2} = \sqrt{2m|\tilde F_0|}\,\frac{2}{3} z^{3/2} e^{\frac{3i\chi}{2} - \overbrace{\frac{3i\chi}{2}}^{\text{Во II-ой обл}}} \to$$

$$\to i\sqrt{2m|\tilde F_0|}\,\frac{2}{3} z^{3/2} = i\int_B^x \sqrt{2m|\tilde F_0|(x-B)}\,dx = i\int_B^x dx\,p(x)$$

$$(B-x)^{-\frac14} = z^{-\frac14} e^{-\frac{i\chi}{4}+\frac{i\chi}{4}} \to z^{-\frac14} e^{\frac{i\pi}{4}}$$

скачок фазы

$$\psi_{III}(x) = \frac{\tilde C}{\sqrt{p(x)}} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_B^x dx\,p(x) + \frac{i\pi}{4}\right]$$

Проследим за напр. ВФ во II-ой обл.

$$-\frac{1}{\hbar}\int_a^x dx\,|p(x)| = -\frac{1}{\hbar}\int_a^B dx\,|p(x)| - \frac{1}{\hbar}\int_B^x dx\,|p(x)| \Rightarrow$$

$$\psi_{II}(x) = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_a^x dx\,|p(x)|\right] =$$

$$= \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_a^B dx\,|p(x)|\right] \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_B^x dx\,|p(x)|\right]$$

$$\psi_{III} = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_a^B dx\,|p(x)|\right] \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_B^x dx\,p(x) + \frac{i\pi}{4}\right]$$

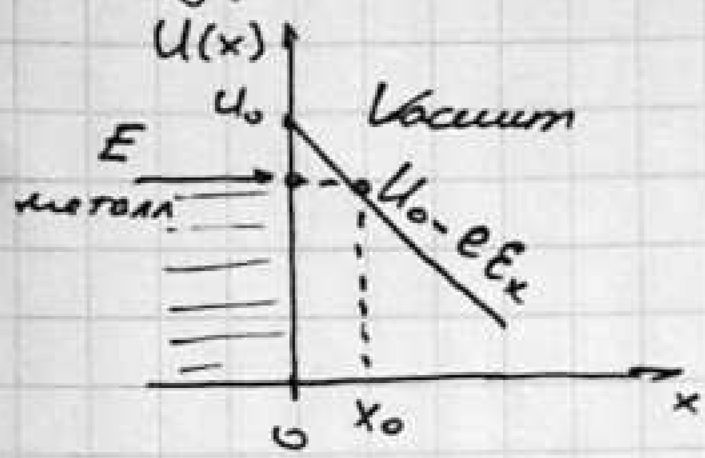
Можно записать коэф. прохождения

$$D = \frac{|\vec j_{прош}|}{|\vec j_{пад}|} \qquad D = D_0 \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_a^B dx\,|p(x)|\right]$$

$$\vec j_{прош} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi\right)$$

Холодная эмиссия электронов из металла

Если к металлу приложить сильное эл. поле с $\mathcal{E} \sim 10^6 \frac{В}{см}$, т.е так чтобы он стал катодом, то такое поле будет вырывать электроны из металла → ток.



$$U_{эфф}(x) = \begin{cases} 0, & x<0 \\ U_0 - e\mathcal{E}x, & x>0 \end{cases}$$

Имеется электрон с $E < U$. Точками поворота для него будут

а: $x = 0$

в: $x_0 = \dfrac{U_0 - E}{e\mathcal{E}}$

$$D = D_0 \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_a^b dx\,|p(x)|\right] =$$

$$= D_0 \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m}\int_0^{x_0} dx\sqrt{|U_0 - e\mathcal{E}x - E|}\right] =$$

$$= D_0 \exp\left[-\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar}\sqrt{U_0 - E}\int_0^{x_0} dx\sqrt{1 - \frac{e\mathcal{E}x}{U_0 - E}}\right] =$$

$$= D_0 \exp\left[-\frac{2\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}\int_0^{x_0} dx\sqrt{1 - \frac{x}{x_0}}\right] = \{x = x_0 t\} =$$

$$= D_0 \exp\left[-\frac{2\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}x_0\int_0^1 dt\sqrt{1-t}\right] =$$

$$= D_0 \exp\left[-\frac{4\sqrt{2m}(U_0 - E)^{3/2}}{3\hbar e\mathcal{E}}\right] \Rightarrow D = D_0 \exp\left(-\frac{\mathcal{E}_0}{\mathcal{E}}\right)$$

Усредним по энергиям электронов

$$\langle D\rangle = \langle D_0\rangle \exp\left(-\frac{\mathcal{E}_0}{\mathcal{E}}\right);\quad j = j_0\langle D\rangle =$$

$$I = I_0 \langle D_0 \rangle e^{-\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon}}$$

Теория α-распада.

Запишем статистический закон радиоактивного распада.

$$dN(t) = -\underbrace{\lambda}_{\text{пост. распада}} N(t)\,dt$$

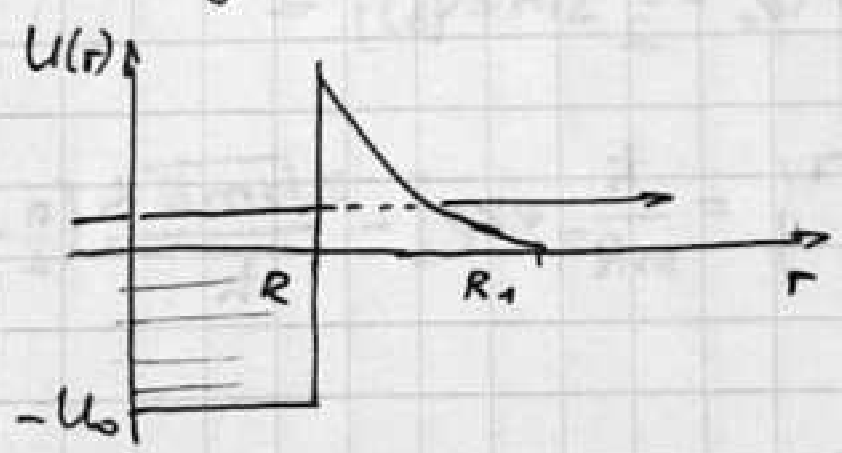
$$\Rightarrow N(t) = N_0 e^{-\lambda t}$$

$$\langle t \rangle = \frac{\int_0^\infty dt\, t\, N(t)}{\int_0^\infty dt\, N(t)} = \frac{1}{\lambda} \to \lambda = \frac{1}{\langle t \rangle}$$

Период полураспада $t = t_{1/2}$, $\Rightarrow \frac{1}{2} N_0$

$$\frac{1}{2} N_0 = e^{-\lambda t_{1/2}} \Rightarrow t_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda}$$

α-распад представляет собой туннельный эффект прохождения α-частицей потенц. барьера



ядро $(A, Z) \to (A-4, Z-2)$

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & r < R \\ \frac{2e^2 Z-2}{r}, & r > R \end{cases}$$

За счет флуктуаций на ней может появиться энергия $E > 0$. Необходимо определить λ, $[\lambda] = \frac{1}{c}$

$$\lambda = \underbrace{n}_{\text{число ударов о стенку за ед. времени}} D$$

$P_\alpha = m_\alpha v_\alpha$, Ширина ямы $R \Rightarrow$

Из соотношения неопределенности

$$m v_\alpha R \sim \hbar \Rightarrow v_\alpha = \frac{\hbar}{mR}$$

$$n = \frac{v_\alpha}{R} = \frac{\hbar}{mR^2}$$

$$\lambda = nD = \frac{\hbar}{mR^2} \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_R^{R_1} dr\sqrt{2m(U(r)-E)}\right] =$$

$$= \left\{ U(R_1) = E = \frac{2e^2(z-2)}{R_1} \Rightarrow R_1 = \frac{2e^2(z-2)}{E} \right\} =$$

$$= \frac{\hbar}{mR^2}\exp\left[-\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar}\sqrt{E}\int_{R_1}^{R_2} dr\sqrt{\frac{R_1}{r}-1}\right] =$$

$$= \left\{ \text{Делаем замену} \quad \begin{matrix} r = R_1 \sin^2\varphi \\ dr = 2R_1 \sin\varphi\cos\varphi\, d\varphi \end{matrix} ; \varphi \Rightarrow \begin{matrix} \pi/2 \\ \arcsin\sqrt{\frac{R}{R_1}} = \varphi_0 \end{matrix} \right\}$$

$$= \frac{\hbar}{mR^2}\exp\left[-\frac{4\sqrt{2mE}\,R_1}{2\hbar}\int_{\varphi_0}^{\pi/2} d\varphi\,(1+\cos 2\varphi)\right] =$$

$$= \frac{\hbar}{mR^2}\exp\left[-\frac{2\sqrt{2mE}\,R_1}{\hbar}\left(\pi/2 - \varphi_0 - \frac{1}{2}\sin 2\varphi_0\right)\right] =$$

$$= \left\{ \varphi_0 = \arcsin\sqrt{\frac{R}{R_1}} \approx \sqrt{\frac{R}{R_1}} \right\} = \frac{\hbar}{mR^2}\exp\left[-\frac{2\sqrt{2mE}\,R_1}{\hbar}\left(\frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{R}{R_1}}\right)\right]$$

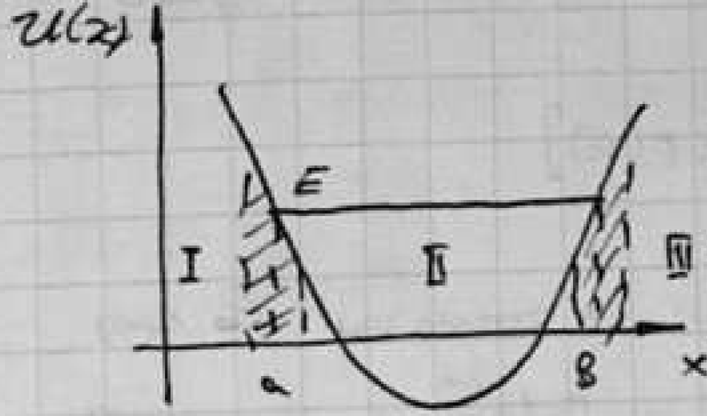
обезразмерим $\Rightarrow$

$$\ln \frac{mR^2}{\hbar}\lambda \Rightarrow \ln\frac{\hbar}{mR^2} t_{1/2} = \frac{A}{\sqrt{E}} - B$$

закон Гейгера–Неттола.

Правило квантования Бора - Зоммерфельда.

Рассмотрим движение частицы в пот. яме



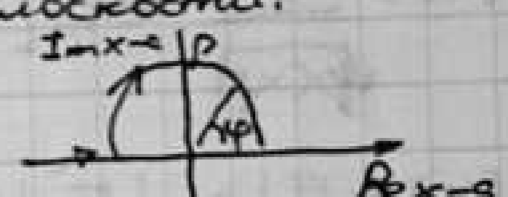
Г.у: в.ф. под барьером должно экспоненциально затухать

$$\psi_I(x) = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_x^a dx\,|p(x)|\right]$$

$$|p(x)| = \sqrt{2m\,|U(x)-E|}$$

$$|U(x)-E| \approx |F_0|\,(a-x), \text{ где } F_0 = -\frac{dU(x)}{dx}\Big|_{x=a}$$

Сделаем обход по верхн. полуплоскости:



$$\rho = (a-x) \qquad \rho = e^{i\varphi}$$

$$\int_x^a dx\,(a-x)^{1/2} = \frac{2}{3}(a-x)^{3/2} = \frac{2}{3}\rho^{3/2} e^{\frac{3i\varphi}{2}} e^{-\frac{3i\varphi}{2}} = \qquad \pi \geq \varphi \geq 0$$

$$= \frac{2}{3}\rho^{3/2} e^{\frac{3i\varphi}{2}} \underbrace{e^{-\frac{3i\pi}{2}}}_{=i} = \underbrace{\frac{2i}{3}\rho^{3/2} e^{\frac{3i\varphi}{2}}}_{I} \to$$

$$\to \frac{2i}{3}\rho^{3/2} = \frac{2i}{3}(x-a)^{3/2} = i\int_a^x dx\,(x-a)^{1/2}$$

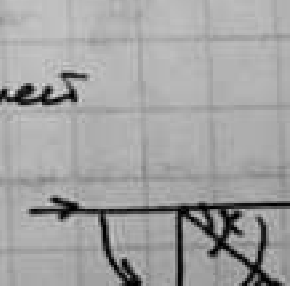
$$[2mF_0(a-x)]^{-1/4} \to [2mF_0(x-a)]^{-1/4} e^{-\frac{i\pi}{4}} \approx$$

$$\approx \frac{1}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{i\pi}{4}}$$

Волна бегущая справа налево $\Rightarrow \psi_{II}^{(1)}(x) = \dfrac{Ce^{\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{p(x)}} \exp\left[-\dfrac{i}{\hbar}\displaystyle\int_a^x dx\,p(x)\right]$

Сделаем обход по нижней

$$\int_x^a dx\,(a-x)^{1/2} = \frac{2}{3}(a-x)^{3/2} =$$



$-\pi \leq \chi \leq 0$

$$= \frac{2}{3} r^{3/2} e^{\frac{3i}{2}\chi} e^{-\frac{3i\chi}{2}} = \frac{2}{3} r^{3/2} e^{\frac{3i\chi}{2}} (-i) \underset{1}{\Rightarrow}$$

$$\underset{2}{\to} -\frac{2i}{3} r^{3/2}$$

$\Rightarrow$ Получим волну бегущую слева направо

$$\psi_{II}^{(2)}(x) = \frac{c e^{-\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{p(x)}} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_a^x dx\, p(x)\right]$$

Суперпозиция этих двух волн — стоячая волна

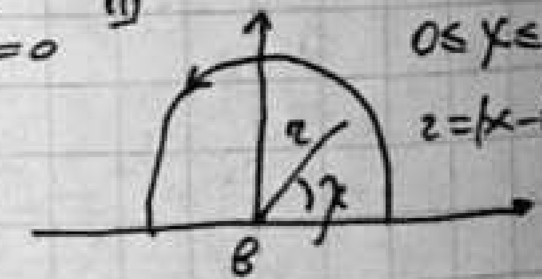
$$\psi_{II}(x) = \psi_{II}^{(1)}(x) + \psi_{II}^{(2)}(x) = \frac{2c}{\sqrt{p(x)}} \cos\left[\frac{1}{\hbar}\int_a^x dx\, p(x) - \frac{\pi}{4}\right]$$

Волновая ф-ия в области III также должна эксп. затухать

$$\psi_{III}(x) = \frac{c'}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_b^x dx\, |p(x)|\right], \quad x > b$$

$$|U(x) - E| \approx |\hat{F}_0|(x-b), \quad \text{где } \hat{F}_0 = -\frac{dU(x)}{dx}\Big|_{x=b}$$

$$\int_b^x dx\, (x-b)^{1/2} = \frac{2}{3}(x-b)^{3/2} = \frac{2}{3} r^{3/2} e^{\frac{3i\chi}{2}} \underbrace{e^{-\frac{3i\chi}{2}}\Big|_{\chi=0}}_{1} \underset{III}{\longrightarrow}$$



$0 \le \chi \le \pi$

$r = |x-b|$

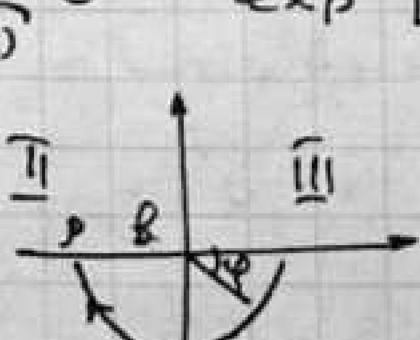
$$\underset{II}{\to} \frac{2}{3} r^{3/2} e^{\frac{3i\pi}{2}} = -\frac{2i}{3} r^{3/2} = -\frac{2i}{3}(b-x)^{3/2} =$$

$$= -i\int_x^b dx\, \sqrt{b-x}$$

Обозначим в.ф как φ

$$\varphi_{II}^{(1)} = \frac{c'}{\sqrt{p(x)}} e^{i\pi/4} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_x^b dx\, p(x)\right]$$

по нижней:



$-\pi \le \varphi \le 0$

$$\Rightarrow \int_{b}^{x} dx\,(x-b)^{1/2} = \frac{2}{3}(x-b)^{3/2} = \frac{2}{3}\rho^{3/2} e^{\frac{3i\varphi}{2}} \cancel{e^{-\frac{3i\varphi}{2}}} \xrightarrow[\text{III}]{\varphi=0}$$

$$\xrightarrow[\text{II}]{} \frac{2}{3} i \rho^{3/2} = \frac{2i}{3}(b-x)^{3/2} = i\int_{x}^{b} dx\,(b-x)^{1/2}$$

$$\Rightarrow \varphi_{\text{II}}^{(2)} = \frac{c'}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{i\pi}{4}} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{x}^{b} dx\,p(x)\right]$$

$\Rightarrow$ получили две бегущие волны

$$\varphi_{\text{II}}(x) = \varphi_{\text{II}}^{(1)}(x) + \varphi_{\text{II}}^{(2)}(x) = \frac{2c'}{\sqrt{p(x)}}\cos\left[\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{b} dx\,p(x) - \frac{\pi}{4}\right] \quad \text{из III в II}$$

Число частиц должно ~~выходить~~ сохранятся,

$\Rightarrow$ плотн вероятн и поток плотн вероятн тоже.

$$\psi_{\text{II}} = \varphi_{\text{II}} \quad ; \quad \psi_{\text{II}}' = \varphi_{\text{II}}'$$

$$\begin{cases} \dfrac{c}{\sqrt{p(x)}}\cos\left[\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_{a}^{x} dx\,p(x) - \dfrac{\pi}{4}\right] - \dfrac{c'}{\sqrt{p(x)}}\cos\left[\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_{x}^{b} dx\,p(x) - \dfrac{\pi}{4}\right] = 0 \\ \text{не будем дифф т.к медленно меняется} \\ \dfrac{c}{\sqrt{p(x)}}\sin\left[\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_{a}^{x} dx\,p(x) - \dfrac{\pi}{4}\right] + \dfrac{c'}{\sqrt{p(x)}}\sin\left[\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_{x}^{b} dx\,p(x) - \dfrac{\pi}{4}\right] = 0 \end{cases}$$

Получили систему двух алгебраических уравнений

для c и c'. Она имеет нетривиальное решение

если ее определитель $= 0$, т.е

$$\sin\left[\frac{1}{\hbar}\int_{a}^{b} dx\,p(x) - \frac{\pi}{2}\right] = 0$$

$$\frac{1}{\hbar}\int_{a}^{b} dx\,p(x) = \pi n + \frac{\pi}{2} \ ; \quad n = 0, 1, 2 \ldots$$

$$\frac{1}{\hbar}\int_a^b dx\, p(x) = \left(n+\frac{1}{2}\right)\pi$$

Интеграл по полному периоду квазиклассического движения составляет (т.е от а до в и от в до а)

$$\oint dx\, p(x) = 2\int_a^b dx\, p(x)$$

$$\frac{1}{2\pi\hbar}\oint dx\, p(x) = n+\frac{1}{2}$$ Правило квантования Бора - Зоммерфельда

Оценим этот интеграл по теореме о среднем

$$\frac{1}{\hbar}\int_a^b dx\, p(x) = \frac{b-a}{\hbar}\langle p\rangle = \frac{b-a}{\langle \lambda\rangle} = \left(n+\frac{1}{2}\right)\pi$$

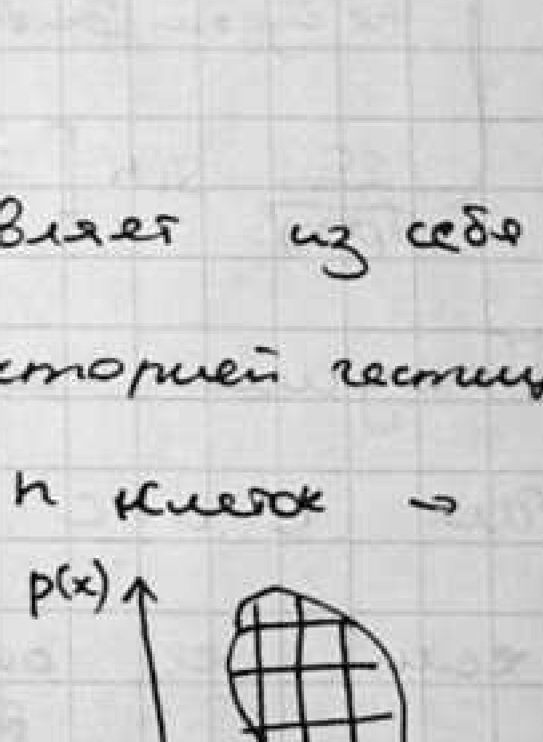
$$\Rightarrow b-a = \underbrace{\left(n+\frac{1}{2}\right)}\pi\langle\lambda\rangle$$

определяет число средних значений длин волн укладывается на интервале $b-a$.

Вспомним условие применимости: $|x-a| \gg \lambda$, $|x-b| \gg \lambda$

$\Rightarrow b-a \gg \lambda \Rightarrow n \gg 1$.

~~Левая часть~~ Интеграл представляет из себя площадь ограниченную фазовой траекторией частицы. Поделив на $2\pi\hbar$ получаем n клеток $\to$ n - квантовых состояний с энергией, не превышающими ее заданного значения, отвечающего рассматриваемой фазовой траектории



Т.е количество состояний, относящихся к элементу объема $\Delta x \Delta p_x$ фаз. пространства

$$\Delta \nu = \frac{\Delta x \Delta p_x}{2\pi\hbar},$$

В трехмерном случае: $\Delta \nu = \frac{\Delta x \Delta y \Delta z \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z}{(2\pi\hbar)^3}$

$$d\nu = \frac{dx\, dp_x}{2\pi\hbar}$$

Одному связанному состоянию в фазовом пространстве отвечает фаз-ый объем $2\pi\hbar$ на одну ступень свободы

$$\oint dx \frac{dp(x)}{dn} = 2\pi\hbar$$

Замена $\frac{dp(x)}{dn} = \frac{dp(x)}{dE} \frac{dE}{dn}$

Величина $\Delta E = \frac{dE}{dn}$ → расстояние между соседними уровнями в яме.

$$E = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow \frac{dp}{dE} = \frac{1}{v}$$

$$\Rightarrow \int \frac{dx}{v} = T = \frac{2\pi}{\omega} \Rightarrow \Delta E = \hbar\omega$$

В квазиклас приближении уровни эквидистантны.

Пронормируем волновую ф-ию

(делаем это только между a и b, т.к вне ямы в.ф экспоненциально затухает)

$$\int dx |\psi(x)|^2 = \tilde{C}^2 \int_a^b dx \frac{\cos^2\left[\frac{1}{\hbar}\int_a^x dx\, p(x) - \frac{\pi}{4}\right]}{p(x)} = 1$$

Косинус быстроосциллирующая ф-ия, т.к

его аргумент большой, поэтому его

квадрат можно заменить на его среднее значение $\frac{1}{2}$

$$\Rightarrow \frac{1}{2}\tilde{C}^2 \int_a^b \frac{dx}{p(x)} = 1 \quad \Big| * m$$

$$m\int_a^b \frac{dx}{p(x)} = \int_a^b \frac{dx}{v(x)} = \frac{\pi}{\omega} \Rightarrow \frac{1}{2m}\tilde{C}^2\frac{\pi}{\omega} = 1$$

$$\tilde{C}^2 = \frac{2m\omega}{\pi} \; ; \quad \tilde{C} = \sqrt{\frac{2m\omega}{\pi}}$$

Отсюда: $\psi(x) = \sqrt{\frac{2m\omega}{\pi p(x)}} \cos\left[\frac{1}{\hbar}\int_0^x dx\, p(x) - \frac{\pi}{4}\right]$

В природе сущ-ет 4 взаимодействие:

1. Гравитационные силы (гравитон?)

2. Электромагнитные силы (фотон γ)

3. Сильное ядерное взаим → между адронами

4. Слабое ядерное взаим → между лептонами.

Лептоны: 6 : $\begin{pmatrix} \nu_e \\ e \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} \nu_\mu \\ \mu^- \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} \nu_\tau \\ \tau^- \end{pmatrix}$ и их античастицы.

электрон мюон таон

Спин у всех => $\frac{1}{2}$

Отличие нейтрино и антинейтрино: для частиц с $m=0$ и $v=c$ мы можем ввести проекцию спина на направление импульса (это величина для $m=0$ сохр) и называется спиральностью. => у нейтрино импульс против спина, а у антинейтрино по спину.

=> Есть три промежуточных бозона: $W^\pm$, Z^0

Сильное взаимодействие работает на расстояниях r

$r_N \approx 0{,}8 \cdot 10^{-15}$ м. Част. обмена $\pi^{\pm, 0}$ → Пион.

Все частицы состоят из кварков, они имеют дробный заряд. Кварков 6.

$\frac{2e}{3}$ 1) $\begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix}$ up 2) down 3) $\begin{pmatrix} c \\ s \end{pmatrix}$ charme 4) strange 5) $\begin{pmatrix} t \\ b \end{pmatrix}$ top 6) bottom спина 1/2

$-\frac{e}{3}$

Можно составить протон: $p = (uud)^{\uparrow\uparrow\downarrow}$

$n = (u, d, d)$ => частицы из 3^x кварков барионы

$\pi^+ = (u, \bar{d})$ $\pi^- = (\bar{u} d)$ $\pi^0 = (u\bar{u} + d\bar{d})$

Сущ-ют дельта частицы:

$\Delta^{++} = (uuu)$ $\uparrow\uparrow\uparrow$

=> У кварков должно быть еще одно квантовое число => цвет: красный, синий, зеленый => белый адрон

~~Кв~~ Кварки экспериментально подтверждены.

Между кварками действуют силы → есть частицы обмена → глюоны g $s = 1$, $m = 0$

Глюонов 8 штук.

=> Всего частиц обмена $\overbrace{\gamma, W^{\pm}, Z^0, g}^{s=1}$ => 12

+ ~~Кв~~ гравитон => 13

Оператор спина

Можно ввести оператор спина и его проекции, это тоже момент импульса только собственный

В класс пределе $\hbar \to 0 \Rightarrow \hbar s \to 0$

$\Rightarrow$ чисто квантовая характеристика

Число проекций спина $2s+1$.

Коммутационные соотношения должны сохраняться

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{S}_k$$

По аналогии собственное значение оператора $\hat{\vec{S}}^2$

$$\vec{S}^2 = s(s+1)$$

Обозначим операторы $\hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y$ для которых.

$$\hat{S}_z \chi_{s\sigma} = \sigma \chi_{s\sigma}; \quad \hat{S}_z \hat{S}_\pm \chi_{s\sigma} = (\sigma \pm 1)\chi_{s\sigma}$$

где $\chi_{s\sigma}$ – совместна собств ф-ия опер. $\hat{\vec{S}}^2$ и $\hat{S}_z$

Получаем, что $\hat{S}_\pm \chi_{s\sigma} = \chi_{s,\sigma\pm 1}$

$\Rightarrow$ Величина проекции спина на ось квантования может меняться на единицу

σ – ограниченная величина и $\sigma_{max} = S$, $\sigma_{min} = -S$

т.е $-S \le \sigma \le S$. Отсюда $\sigma_{max} - \sigma_{min} = 2S$

$\Rightarrow$ Отсюда S может принимать как целые, так и полуцелые значения.

Полный момент импульса частички:

$$\hat{j} = \hat{l} + \hat{s} \qquad |l - s| \le j \le l + s$$

$$[\hat{j}_i, \hat{j}_k] = i\,\varepsilon_{ijk}\,\hat{j}_m$$

Если $s = \frac{1}{2}$ $\quad 2s + 1 = 2 \Rightarrow$ две проекции

$$s_z = \sigma = \pm\frac{1}{2}$$

В матричной форме соответствует двухрядная матрица

Для спина $\frac{1}{2}$ ввели оператор $\hat{s} = \frac{1}{2}\vec{\sigma}$

$$[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] = 2i\,\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k$$

Собственные значения $\sigma = \pm\frac{1}{2}$

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$ — матрицы Паули

Е из $(\hat{\sigma}_x)_{\sigma,\sigma-1} = (\hat{\sigma}_x)_{\sigma-1,\sigma} = \sqrt{(s+\sigma)(s-\sigma+1)}$

$$(\hat{\sigma}_y)_{\sigma,\sigma-1} = -(\hat{\sigma}_y)_{\sigma-1,\sigma} = -i\sqrt{(s+\sigma)(s-\sigma+1)}$$

$(\hat{\sigma}_z)_{\sigma\sigma} = 2\sigma.$ $\quad$ $\{$ по ан: $(l_y)_{m,m-1} = -(l_y)_{m-1,m} = -\frac{i}{2}\sqrt{(l+m)\times(l-m+1)}$

$$\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Рассмотрим комбинацию.

$$2i(\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x) = (2i\hat{\sigma}_x)\hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y(2i\hat{\sigma}_x) = \{2i\sigma_x = [\hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z]$$

$$= (\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y)\hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y(\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y) =$$

$$= \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y - \hat{\sigma}_z\underbrace{\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_y}_{1} + \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y = 0.$$

$$\Rightarrow \hat\sigma_x \hat\sigma_y + \hat\sigma_y \hat\sigma_x = 0$$ антикоммутатор оператора

$$\{\hat\sigma_x, \hat\sigma_y\} = \hat\sigma_x \hat\sigma_y + \hat\sigma_y \hat\sigma_x = 0$$

$$\{\hat\sigma_x, \hat\sigma_z\} = 0 \qquad \{\hat\sigma_y, \hat\sigma_z\} = 0$$

$$\Rightarrow \{\hat\sigma_i ; \hat\sigma_j\} = 2\delta_{ij}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \hat\sigma_i \hat\sigma_j - \hat\sigma_j \hat\sigma_i = 2i\varepsilon_{ijk}\hat\sigma_k \\ \hat\sigma_i \hat\sigma_j + \hat\sigma_j \hat\sigma_i = 2\delta_{ij} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \hat\sigma_i \hat\sigma_j = i\varepsilon_{ijk}\hat\sigma_k + \delta_{ij}$$

$\Rightarrow$ Произведение любого количества операторов $\hat\sigma_i$ можно упростить до суммы двух слагаемых, одно из которых не зависит от $\hat\sigma_i$, а второй содержит $\hat\sigma_i$ в первой степени

Матрицы Паули вместе с единичной матрицей составляют полный набор двухрядных матриц, по которым можно разложить любую двухрядную матрицу $\hat A$

$$\hat A = \alpha_1 \hat\sigma_x + \alpha_2 \hat\sigma_y + \alpha_3 \hat\sigma_z + \alpha_4.$$

$$\hat{\vec\sigma}^2 = 3 \qquad (\hat{\vec\sigma}\vec a)(\hat{\vec\sigma}\vec b) = \bar a \bar b + i[\bar a, \bar b]\hat{\vec\sigma}$$

$$Sp\, \hat\sigma_i = 0 \qquad \langle \hat{\vec S}^2 \rangle = \frac{3}{4} \qquad \langle \hat{\vec\sigma}^2 \rangle = 3.$$

$$Sp\, \hat\sigma_i \hat\sigma_j = 2\delta_{ij}$$

При повороте системы координат на α вокруг оси z

спиновые волн. ф-ция преобр при помощи

оператора $\hat{T}(\alpha) = \exp(i\alpha\hat{S}_z)$

$$\hat{\psi}(\vec{r},\sigma) = e^{i\alpha\hat{S}_z}\psi(\vec{r},\sigma) = e^{i\alpha\sigma}\psi(\vec{r},\sigma)$$

При повороте на $\alpha = 2\pi$ спин. ф-ии домножаются на

$\exp(2\pi i\sigma) = (-1)^{2s}$

=> Если спин целый => преобразование ничего не меняет

=> инвариантность

полуцелый => нет инвариантности (надо 4π)

Спиновые функции.

$\psi(\underbrace{x, y, z}_{\text{непр}}, \underbrace{\sigma}_{\text{дисн}})$ Проекция σ принимает $2s+1$

значение → спиновые компоненты в. ф.

Вероятность того, что частица имеет σ

$$w(\sigma) = \int d^3r \, |\psi(x,y,z,\sigma)|^2$$

Вероятн нах в d^3r при любом σ.

$$dw(\vec{r}) = w(\vec{r}) d^3r = d^3r \sum_{\sigma=-s}^{s} |\psi(x,y,z;\sigma)|^2$$

Операторы действ на $\psi(x,y,z,\sigma)$ должны быть

$(2s+1)$ — рядными матрицами.

Если $s=0$, то вф имеет 1 комп, т.е скаляр в

спиновом пространстве

$s = 1/2$, то вф будет содержать две компоненты

$\psi(1/2)$, $\psi(-1/2)$. Перепишем в виде матриц

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi(1/2) & 0 \\ \psi(-1/2) & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi^1 & 0 \\ \psi^2 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi^1 \\ \psi^2 \end{pmatrix}$$

$$\psi^+ = \begin{pmatrix} \psi^{1*} & \psi^{2*} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = (\psi^{1*} \; \psi^{2*})$$

Эта двухкомп. величина называется спинор

первого ранга.

Сделаем поворот СК

$$\psi^{1'} = a\psi^1 + b\psi^2$$
$$\psi^{2'} = c\psi^1 + d\psi^2 \quad \to \psi^{\lambda'} = (\hat{U}\psi)^\lambda, \text{ где } \hat{U} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

Пусть имеется два спинора

$$\varphi = \begin{pmatrix} \varphi^1 \\ \varphi^2 \end{pmatrix} \quad \chi = \begin{pmatrix} \chi^1 \\ \chi^2 \end{pmatrix}$$

Рассмотрим комбинацию

$\varphi^1\chi^2 - \varphi^2\chi^1$. Сделаем поворот:

$$\varphi^{1'}\chi^{2'} - \varphi^{2'}\chi^{1'} = (a\varphi^1 + b\varphi^2)(c\chi^1 + d\chi^2) -$$
$$-(c\varphi^1 + d\varphi^2)(a\chi^1 + b\chi^2) = \cancel{ac\varphi^1\chi^1} + \cancel{bd\varphi^2\chi^2} -$$
$$- \cancel{ac\varphi^1\chi^1} - bc\varphi^1\chi^2 - ad\varphi^1\varphi^2 - \cancel{bd\varphi^2\chi^2} -$$
$$- ad\varphi^1\chi^2 + bc\varphi^2\chi^1 = (ad - bc)(\varphi^1\chi^2 - \varphi^2\chi^1)$$

$ad - bc = 1 \to$ не изм при повор

Только скаляр преобразуется сам через себя.

$\Rightarrow$ спину 0 отвечает антисимметричный спинор

$ad - bc = 1 \Rightarrow$ определитель $\det U = 1$.

Вероятн нахожд частицы в опред точке простр

$$\sum_\sigma |\varphi(\sigma)|^2 = |\varphi^1|^2 + |\varphi^2|^2 = \varphi^1\varphi^{1*} + \varphi^2\varphi^{2*}$$

тоже должна быть инвариантной при лин. преобр $\hat{U}$

Дл преобразование оставляющее инвариантной

сумму квадратов модулей преобр величин унитарное

$\Rightarrow \hat{U}$ - унитарна $\quad \hat{U}^+ \hat{U} = 1$

т.е $\begin{pmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = 1 =$

$$= \begin{pmatrix} |a|^2 + |c|^2 & a^*b + c^*d \\ ab^* + cd^* & |b|^2 + |d|^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

8 нез. велич. $\begin{cases} a = a_1 + i a_2 \\ b = b_1 + i b_2 \\ c = c_1 + i c_2 \\ d = d_1 + i d_1 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} d = a^* \\ b = -c^* \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} a_1 = d_1 \\ a_2 = -d_2 \\ b_1 = -c_1 \\ b_2 = c_2 \end{cases}$

$\Rightarrow$ осталось 3 незав величины определяющих поворо

$\Rightarrow$ углы Эйлера.

Спинор второго ранга $\rightarrow$ 4^x компонентная величина

$\psi^{\lambda\mu}$, где $\lambda = 1, 2$; $\mu = 1, 2$.

При повороте преобр как произведение спиноров первого ранга $\psi^\lambda \chi^\mu$. Совокупность трех симметричных комп. спинора отвечает спину 1:

$\psi^1, \chi^1, \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi^1 \chi^2 + \psi^2 \chi^1), \psi^2 \chi^2$, а спину 0

антисим спинор $\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi^1 \chi^2 - \psi^2 \chi^1)$

Спинор $\varphi^1\chi^1$ отвечает $\sigma = 1$, $\varphi^2\chi^2 \Leftrightarrow \sigma = -1$.

$$\frac{\varphi^1\chi^2 + \varphi^2\chi^2}{\sqrt{2}} \Rightarrow \text{проекция } \sigma = 0$$

Рассмотрим систему n частиц со спином $1/2$.

Максим. величина проекции полного спина $\frac{n}{2}$.

В таком случае все компоненты в.ф. $\psi(\sigma_1, \sigma_2 \dots \sigma_n)$

равны 0, кроме $\psi(1/2, 1/2 \dots 1/2)$.

Если рассматривать вф такой системы как произведение

n спиноров 1-го ранга $\varphi^\lambda\chi^\mu\dots$, каждый из которых

принадлежит частице со спином $1/2$, то у каждого

из них отличаться от 0 будет только одна комп-та

с $\lambda = \mu = \dots = 1$, т.е только $\varphi^1\chi^1$.

Т.е состоянию системы отвечает спинор n-го ранга,

симметричный по своим индексам. Если сделать

поворот с.к., то получим некий спинор n-го ранга

– тоже симметричный. $\overbrace{11\dots1}^{s+\sigma}\overbrace{22\dots2}^{s-\sigma}$

$$\psi(\sigma) = \sqrt{\frac{(2s)!}{(s+\sigma)!\,(s-\sigma)!}}\,\psi^{\lambda\mu\dots}$$

$\varphi^1\chi^1 = |11\rangle$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi^1\chi^2 + \varphi^2\chi^1) = |1\,0\rangle$$

$\varphi^2\chi^2 = |1\,-1\rangle$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi^1\psi^2 - \chi^2\chi^1) = |0\,0\rangle$$

Принцип неразличимости частиц

Есть система тождественных частиц, все частицы одинаковы. $\xi_{j_i} = (x_i, y_i, z_i, \sigma_i)$

В класс. механике пронумеровав частицы, можно проследить за каждой частицей, в квантовой мех. из-за принципа неопределенности так сделать нельзя => полная неразличимость частиц.

Гамильтониан системы тожд. частиц инвариантен относительно перестановки любой пары тождественных частиц. $\hat{H}(\xi_1, \xi_2 .. \xi_i, ... \xi_j ...) = \hat{H}(\xi_1, \xi_2 ... \xi_j .. \xi_i ...)$

$$\psi(\xi_1, \xi_2 ... \xi_i ... \xi_j ...) = C\psi(\xi_1, \xi_2 ... \xi_j ... \xi_i)$$

$$C^2 = 1 \Rightarrow C = \pm 1$$

Если $C = +1 \Rightarrow$ в.ф. симметричная

$C = -1 \Rightarrow$ в.ф. антисимметричная

Покажем, что если система в какой-то момент времени система описывается сим/антисим. в.ф. то и во все остальные мом. времени она описыв сим/антисим. в.ф.

Из ур. Шредингера $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi \; | \times dt$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} dt = \hat{H}\psi \, dt$$

$\frac{\partial \psi}{\partial t} dt = d_t \psi \quad \to d_t\psi = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\psi \, dt$

Если ψ - симметрична в t_0, то она будет симметрична в $t_0 \pm dt$, знак приращения не изменить

ψ - антисимметрична в t_0, $\Rightarrow$ т.к знак прирощ. изменит

В природе сущ. сист ТЧ описыв антисимм в.ф.

и антисимм в.ф.

целый спин

Симметр в.ф $\to$ бозоны $\to$ статистика Бозе - Эйнштейна

полуцелый спин

Антисимм. в.ф. $\to$ фермионы $\to$ статистика Ферми - Дирака

Волновые ф-ии для систем ТЧ.

Симметричные в.ф:

Пусть у нас есть 2 тождественных бозона:

$$\psi(q_1, q_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\underbrace{\psi_{\nu_1}(q_1)\psi_{\nu_2}}_{\text{совокупн кв. чисел характ к ч}}(q_2) + \psi_{\nu_1}(q_2)\psi_{\nu_1}(q_1)],$$

ψ_{ν_1}, ψ_{2} - в.ф. стац. сост в которых нах отд част.

Если n невзаим. бозона:

$$\psi(q_1, q_2 \dots q_n) = \sqrt{\frac{n_1! \, n_2! \dots n_n!}{n!}} \sum \psi_{\nu_1}(q_1)\psi_{\nu_2}(q_2) \dots \psi_{\nu_n}(q_n)$$

n_i - определяет сколько частиц в $i^{\text{м}}$ состоянии

Антисимметричная в. ф.

Есть 2 тождественных фермиона

$$\psi(q_1, q_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_{\nu_1}(q_1)\psi_{\nu_2}(q_2) - \psi_{\nu_1}(q_2)\psi_{\nu_2}(q_1)\right] =$$

$$= \left\{ \begin{matrix} q_1 \to q_2 \\ q_2 \to q_1 \end{matrix} \right\} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_{\nu_1}(q_1) & \psi_{\nu_1}(q_2) \\ \psi_{\nu_2}(q_1) & \psi_{\nu_2}(q_2) \end{vmatrix}$$

Если n частиц, то

$$\psi(q_1, q_2 \ldots q_n) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} \psi_{\nu_1}(q_1) & \psi_{\nu_1}(q_2) & \ldots & \psi_{\nu_1}(q_n) \\ \psi_{\nu_2}(q_1) & \psi_{\nu_2}(q_2) & \ldots & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \psi_{\nu_n}(q_1) & \psi_{\nu_n}(q_2) & \ldots & \psi_{\nu_n}(q_n) \end{vmatrix}$$

Перестановка двух частиц отвечает перестановке двух столбцов определителя.

Если два тожд фермиона находятся в одном состоянии с ν_i => то два ряда определителя одинаковы => определитель 0. Т.е в системе n фермионов два или более не могут находиться одновременно в одном состоянии => Принцип Паули

Обменное взаимодействие.

Оператор Гамильтона $\hat{H}$ в отсутствие магн поля не зависит от спина, т.е не содержит спинов частиц. Т.е в.ф. системы n ТЧ.

$$\Psi(q_1 \dots q_n) = \psi(r_1, \dots r_n)\,\chi(\sigma_1, \dots \sigma_n)$$

Рассмотрим систему двух тождественных частиц $\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$, она может быть как симметрична так и антисимметрична. Если симметрично, то симметрична и коорд и спиновая часть, антисимм. -> антисимм корд и спин. часть. =>

=> не все решения ур-я Шредингера реализуются

Выберем начало СК посередине прямой соединяющей две рассматриваемые ТЧ. Перестановка частиц эквивалентна операции инверсии => вф умножается на $(-1)^{l}$ l - орб. момент отн. движ. Т.е система двух т.ч с нулевыми спинами может иметь только четной орбит. момент.

Если система содержит две ТЧ, со спином 1/2 то их полная симм ВФ должно быть антисимм при перестановке частиц

=> При антисимм спин. ф-ци отвечающе спину 0 координ. ф-ия будет симметричной. При симм спин. ф-ии, отвеч спину 1 -> коорд антисимм.

Т.е Возможные значения энергии системы двух ТЧ со спинами 1/2 зависят от полного спина

=> ∃ взаимодействие частиц зависящие от полного спина системы => называется обменным взаимодействием

В системе двух ТЧ с произвольными спинами S полная В.ф умножается на $(-1)^{2S}$, т.е она симметрична при целом спине S (бозоны) и антисимметрична при полуцелых S (фермионы). Спиновая ВФ получает $(-1)^{2S-S}$, где S - полный спин систем. Отсюда коорд часть умножается на $(-1)^{S}$ -> симметрична при четном полном спине и антисимм при нечетном

Вторичное квантование. Случай статистики Бозе.

Идея вторичного квантования в пользовании векторами состояния

Операторы: $\hat{a}_i$ – уничтожение частицы в $i^{\text{м}}$ сост

$\hat{a}_i^+$ – рождение частицы в $i^{\text{м}}$ состоянии

$$\hat{a}_i |n_1 n_2 \ldots n_i \ldots\rangle = \sqrt{n_i}\, |n_1 n_2 \ldots n_i - 1 \ldots\rangle$$

$$\hat{a}_i = |n_1 n_2 \ldots n_i - 1 \ldots\rangle \sqrt{n_i} \langle n_1 n_2 \ldots n_i \ldots|$$

$\hat{a}_i^+$ → эрмитово сопряж и $n_i \to n_i + 1$

$$\hat{a}_i^+ = |n_1 n_2 \ldots n_i + 1 \ldots\rangle \sqrt{n_i + 1} \langle n_1 n_2 \ldots n_i \ldots|$$

$$\hat{a}_i^+ |n_1 n_2 \ldots n_i \ldots\rangle = \sqrt{n_i + 1}\, |n_1 n_2 \ldots n_i + 1 \ldots\rangle$$

Матричные элементы:

1) Для $\hat{a}_i$: единств отлич от 0 эл:

$$\langle n_i - 1 | \hat{a}_i | n_i \rangle = \sqrt{n_i}$$

2) $\hat{a}_i^+$: $\langle n_i + 1 | \hat{a}_i^+ | n_i \rangle = \sqrt{n_i + 1} = \langle n_i | \hat{a}_i | n_i + 1 \rangle^*$

Рассмотрим:

$$\langle n_i | \hat{a}_i \hat{a}_i^+ | n_i \rangle = \langle n_i | \hat{a}_i | n_i + 1 \rangle \sqrt{n_i + 1} = n_i + 1.$$

$-$

$$\langle n_i | \hat{a}_i^+ \hat{a}_i | n_i \rangle = n_i$$

$$= \langle n_i | \hat{a}_i \hat{a}_i^+ - \hat{a}_i^+ \hat{a}_i | n_i \rangle = 1.$$

$$\Rightarrow [\hat{a}_i, \hat{a}_i^+] = 1.$$

Оператор $\hat{a}_i^+ \hat{a}_i = \hat{n}_i$ - оп. числа частиц.

$$\left.\begin{aligned}&\hat{a}_i \hat{a}_k - \hat{a}_k \hat{a}_i = 0\\ &\hat{a}_i^+ \hat{a}_k^+ - \hat{a}_k^+ \hat{a}_i^+ = 0\end{aligned}\right\} [\hat{a}_i \hat{a}_k^+] = \delta_{ik}$$

Вакуум: все числа заполн $= 0$

$\hat{a}_i |0\rangle = 0 \qquad \hat{a}_i^+ |0\rangle = |1_i\rangle$

$\hat{a}_i \hat{a}_i^+ |0\rangle = |0\rangle$

$\hat{a}_i \hat{a}_k^+ |0\rangle = \delta_{ik} |0\rangle.$

Любой вектор состояния

$$|n_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_i}} (\hat{a}_i^+)^{n_i} |0\rangle$$

$$|n_1 n_2 \ldots n_i \ldots\rangle \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \ldots n_i! \ldots}} (\hat{a}_1^+)^{n_1} (\hat{a}_2^+)^{n_2} \ldots (\hat{a}_i^+)^{n_i} \ldots |0\rangle$$

Одночастичный оператор — действ на переменные одной частицы

$= |1_i\rangle \Rightarrow |i\rangle = \hat{a}_i^+ |0\rangle$ - выбрали такой полный ортонорм базис одночастичных векторов состоян

$$\hat{f}^{(1)} |\chi\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i| \hat{f}^{(1)} |\chi\rangle = \{\langle i|\hat{f}^{(1)}|\chi\rangle = f_{i\chi}^{(1)}\} \text{ матр эл.}$$

$$= \sum_i \hat{f}_{i\chi} \hat{a}_i^+ |0\rangle = \sum_{i,k} f_{ik}^{(1)} \hat{a}_i^+ \delta_{k\chi} |0\rangle = \{\hat{a}_i \hat{a}_k^+ |0\rangle = \delta_{ik} |0\rangle\}$$

$$= \sum_{i,k} f_{ik}^{(1)} \hat{a}_i^+ \hat{a}_k \hat{a}_\chi^+ |0\rangle = \sum_{i,k} f_{ik}^{(1)} \hat{a}_i^+ \hat{a}_k |\chi\rangle$$

получили

$$\Rightarrow \hat{f}^{(1)} = \sum_{i,k} f_{ik}^{(1)} \hat{a}_i^+ \hat{a}_k$$

Матричный элемент

$$\langle n_i, n_k - 1 | \hat{f}^{(1)} | n_i - 1, n_k \rangle = \langle n_i, n_k - 1 | \sum_{l,m} f^{(1)}_{lm} \hat{a}_l^+ \hat{a}_m | n_i - 1, n_k \rangle =$$

$$= \sum_{l,m} f^{(1)}_{lm} \sqrt{n_k}\, \delta_{mk} \sqrt{n_i}\, \delta_{li} = f^{(1)}_{ik} \sqrt{n_i n_k}$$

→ сделаем обобщение на две частицы

$$\hat{f}^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{iklm} \langle ik | \hat{f}^{(2)} | lm \rangle \hat{a}_i^+ \hat{a}_k^+ \hat{a}_l \hat{a}_m =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{iklm} f^{(2)}_{iklm} \hat{a}_i^+ \hat{a}_k^+ \hat{a}_l \hat{a}_m$$ – двухчастичный оператор

Запишем Гамильтониан:

$$\hat{H} = \sum_{\alpha} \hat{H}^{(1)}_{\alpha} + \sum_{\alpha > \beta} \hat{U}^{(2)} (\vec{r}_\alpha, \vec{r}_\beta) + \ldots$$

пот. энерг част во вн. поле

$$\hat{H}_\alpha = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_\alpha + \hat{U}^{(1)}(\vec{r}_\alpha)$$

$$\hat{H} = \sum_{i,k} H^{(1)}_{ik} \hat{a}_i^+ \hat{a}_k + \frac{1}{2} \sum_{i,k,l,m} U^{(2)}_{iklm} \hat{a}_i^+ \hat{a}_k^+ \hat{a}_l \hat{a}_m$$

Если взаим. частиц нет, то матрица диагональна,

собств значения → энергии

$$H^{(1)}_{ik} = E\, \delta_{ik}$$

$$\hat{H} = \sum_i E_i \hat{a}_i^+ \hat{a}_i = \sum_i E_i \hat{n}_i$$

Полная энергия $E = \langle n_1 n_2 \ldots | \hat{H} | n_1 n_2 \ldots \rangle =$

$$= \sum_i E_i n_i$$

Вторичное квантование. Случай статистики Ферми.

Перенормируем все одночастичные состояния ϑ_i, чтобы соблюдался такой порядок.

$$\vartheta_1 < \vartheta_2 < \dots \vartheta_i < \dots$$

Согласно принципу Паули никакие 2 фермиона не могут находиться в одном состоянии. Любое число заполн. может принимать только 2 значения 0 и 1.

Действие оператора уничтожения

$$\hat{a}_i |n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle = (-1)^{\sum_{\alpha=1}^{i-1} n_\alpha} \delta_{n_i 1} |n_1 n_2 \dots n_i - 1\rangle$$

В явном виде:

$$\hat{a}_i = |n_1 n_2 \dots n_i - 1 \dots\rangle (-1)^{\sum_{\alpha=1}^{i-1} n_\alpha} \delta_{n_i 1} \langle n_1 n_2 \dots n_i \dots|$$

Оператор рождения:

$\hat{a}_i^+$, заменим $n_i \to n_i + 1$; $\delta_{n_i 1} \to \delta_{n_i 0}$

$$\Rightarrow \hat{a}^+ = |n_1 n_2 \dots n_i + 1 \dots\rangle (-1)^{\sum_{\alpha=1}^{i-1} n_\alpha} \delta_{n_i 0} \langle n_1 n_2 \dots n_i \dots|$$

Применим к вектору состояния.

$$\hat{a}_i^+ |n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle = (-1)^{\sum_{\alpha=1}^{i-1} n_\alpha} \delta_{n_i 0} |n_1 n_2 \dots n_i + 1 \dots\rangle$$

Можно построить любой вектор состояния, если мы выбрали знак вакуумного состояния.

$$(\hat{a}_1^+)^{n_1} (\hat{a}_2^+)^{n_2} \dots (\hat{a}_i^+)^{n_i} \dots |0\rangle = |n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle$$

Отличные от 0 диагональные матр. элементы

$$\langle n_1 n_2 \ldots n_i - 1 \ldots | \hat{a}_i | n_1 n_2 \ldots n_i \ldots \rangle = (-1)^{\sum_{\alpha=1}^{i-1} n_\alpha} \delta_{n_i 1}$$

$$\langle n_1 n_2 \ldots n_i + 1 | \hat{a}_i^+ | n_1 n_2 \ldots n_i \ldots \rangle = (-1)^{\sum_{\alpha=1}^{i-1} n_\alpha} \delta_{n_i 0}$$

Матр элементы $\hat{a}_i^+ \hat{a}_i$, $\hat{a}_i \hat{a}_i^+$ (для упрощ одн част в i сост)

$$\langle n_i | \hat{a}_i^+ \hat{a}_i | n_i \rangle = \delta_{n_i, 1}$$

$$\langle n_i | \hat{a}_i \hat{a}_i^+ | n_i \rangle = \delta_{n_i 0}$$

$$\delta_{n_i 1} = n_i \; ; \quad \delta_{n_i 0} = 1 - n_i$$

$$\Rightarrow \langle n_i | \hat{a}_i^+ \hat{a}_i + \hat{a}_i \hat{a}_i^+ | n_i \rangle = 1.$$

$\Rightarrow$ антикоммутатор

$$\hat{a}_i^+ \hat{a}_i + \hat{a}_i \hat{a}_i^+ - \{ \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \} = 1$$

$$\{ \hat{a}_i \hat{a}_k \} = 0 \qquad \{ \hat{a}_i^+ \hat{a}_k^+ \} = 0 \qquad \{ \hat{a}_i, \hat{a}_k^+ \} = \delta_{ik}.$$

Если $i = k$, то $\hat{a}_i \hat{a}_i = \hat{a}_i \hat{a}_i = 0.$

т.е ~~[illegible]~~ получаем принцип Паули, в одном состоянии не более одного тождественного фермиона.

Одночастичный оператор

$$\hat{f}^{(1)} = \sum_{ik} f_{ik}^{(1)} \hat{a}_i^+ \hat{a}_k$$

Матричный элемент:

$$\langle n_i, n_k - 1 | \hat{f}^{(1)} | n_i - 1, n_k \rangle = \sum_{i,k} (-1)^{n_i - 1} \delta_{n_k 1} \delta_{n_i 1} f_{ik}^{(1)} =$$

$$= f_{ik}^{(1)} \delta_{n_k 1} \delta_{n_i 1}.$$

1) Принцип суперпозиции.
3) Операторы.
6) Алгебра операторов.
7) Непрерывный спектр.
9) Оператор Гамильтона.
10) Дифер операторов по времени.
12) Стационарные состояния.
15) Алгебра матриц.
22) Импульс.
26) Соотношение неопределенностей.
29) Уравнение шредингера.
33) Общие свойства одномерного движения.
36) Коэфициент прохождения.
39) Симметричная прямоугольная потенциальная яма.
46) Гармонический осцилятор.
51) Операторы a^, a^+.
53) Оператор момента импульса.
56) Собственные значения и собственные функциии оператора момента импульса.
60) Четность состояния.
61) Сложение моментов.
62) Задача двух тел.
66) Свободное движение с определенными значениями орбитального момента.
72) Различные представления ветора состояния.
75) Различные представления операоров.
77) Канонические преобразования.
79) Шредингеровское представление.
81) Гайзенберговское представление.
82) Представление взаимодействия.
85) Возмущения, не зависящие от времени.
88) Возмущения, зависящие от времени.
90) Переходы в непрерывном спектре.
93) Волновая функция в классическом приближении.
97) Прохождение через потенциальный барьер произвольной формы в квазикласс приближении.
101) Теория альфа-распада.
103) Правило квантования Бора-Зоммерфельда.
109) Виды взаимодействий.
111) Оператр спина.
115) Спиновые функции.
119) Принцип неразличимости частиц.
121) Антисимметрчная в.ф.
122) Обменное взаимодействие.