

3. Рівняння Шредінгера як основа квантового опису мікросвіту. Загальні принципи відшукування його розв'язків, які мають фізичний зміст. Lom+ Вільний рух частинок.

Рівняння Шредінгера – одне з основних рівнянь квантової механіки. Воно визначає

зміну квантових станів з впливом часу. Подається у вигляді: $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$, (1)

де H – оператор Гамільтона системи, співпадає з оператором енергії, якщо відсутня залежність від часу. Для нерелятивістського руху частинки масою μ у потенціальному полі $U(r)$ оператор \hat{H} дійсний, і є сумою кінетичної та потенціальної енергії руху

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + \hat{U}(r) \quad (2)$$

В наслідок комплексного задання рівняння має періодичні розв'язки. Тому його також називають хвильовим рівнянням Шредінгера, а розв'язки – хвильовими функціями. Рівняння Шредінгера відображає принцип причинності у квантовій механіці, бо визначає стан системи хвильовою функцією $\psi(t)$ у будь-який подальший момент часу якщо відомий розв'язок у початковий момент.

Збереженні нормування хвильової функції з часом

З рівняння (1) маємо $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) = \psi^* \hat{H} \psi - \psi \hat{H}^* \psi^*$, (6); інтегруємо по всім значенням змінних і враховуємо самоспряженість \hat{H} .

$$\text{Маємо } \frac{d}{dt} \int \psi^* \psi d\tau = 0 \quad (5)$$

Якщо в вираз (6) підставити явний вираз (2), то отримуємо рівняння неперервності:

$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0$, де $\rho = \psi^* \psi$ – густина імовірності (імовірність знаходження частинки в певній ділянці простору), а \vec{j} – вектор густини потоку імовірності.

Загальні принципи відшукування його розв'язків, які мають фізичний зміст

Умови, які накладаються на хвильову функцію мають загальний фізичний зміст.

Хвильова функція повинна бути визначена, неперервна і однозначна у всьому просторі. Умова неперервності повинна виконуватись у будь-якому полі, навіть якщо $U(x,y,z)$ має поверхні розриву. На поверхнях розриву вимагається також неперервність і похідної хвильової функції (умови зшивки). Неперервність не вимагається у випадку нескінченних потенціальних ям та бар'єрів. В області простору, де потенціал $U = \infty$,

частинка не може потрапити, тобто $\psi = 0$. Неперервність ψ вимагає, щоб на краях ями $\psi = 0$; похідні у цьому випадку можуть мати розрив.

Вільний рух частинок

Рівняння (1) з оператором $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$ відповідає хвильовій функції, що описує вільний рух частинки в певному значенні імпульса та енергії. Хвильові функції такого рівняння – плоскі хвилі з частотою E/\hbar та хвильовим вектором $k = p/\hbar$. Відповідна довжина хвилі $\lambda = 2\pi\hbar/p$ зветься де Бройлівською довжиною хвилі частинки.

4. Одномірний рух та його властивості.

Якщо потенціал залежить тільки від x , то хвильова функція шукається як добуток функцій від y, z (рівняння вільної частинки для двох вимірів) на функцію від

$$x \text{ (одномірне рівняння Шредінгера } \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)]\psi = 0 \text{)} \quad (7)$$

Покажемо, що енергетичні рівні для одномірної задачі не вироджені:

Доводиться від протилежного. Нехай ψ_1 і ψ_2 — дві різні власні хвильові функції, які відповідають певному енергетичному рівню (одному). Вони задовільняють рівняння

$$(7), \text{ отже } \frac{\psi_1''}{\psi_1} = \frac{2m}{\hbar^2} (U - E) = \frac{\psi_2''}{\psi_2} \text{ або } \psi_1'' \psi_2 - \psi_1 \psi_2'' = 0. \text{ Проінтегрувавши вийде}$$

$$\psi_1' \psi_2 - \psi_1 \psi_2' = \text{const}$$

З умови збіжності на нескінченності $\psi_1 = \psi_2 = 0$, то константа рівна 0, а отже

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

Розв'язавши рівняння отримали $\psi_1 = \text{const} \cdot \psi_2$ - по суті однакові функції. Отже рівні не вироджені.

Будем считать, что функция $U(x)$ стремится при $x \rightarrow \pm\infty$ к конечным пределам (но отнюдь не должна быть монотонной функцией).

Предел $U(+\infty)$ примем за начало отсчета энергии (т. е. положим $U(+\infty) = 0$), а $U(-\infty) = U_0$ и будем считать, что $U_0 > 0$. Дискретный спектр лежит в области таких значений энергии, при которых частица не может уйти на бесконечность; для этого энергия должна быть меньше обоих пределов $U(+\infty)$ т. е. должна быть отрицательной: $E < 0$;

Рассмотрим теперь область положительных значений энергии, меньших чем U_0 :

$$0 < E < U_0$$

В этой области спектр будет непрерывным, а движение частицы в соответствующих стационарных состояниях — инфинитным, причем частица уходит в сторону $x = +\infty$. Легко видеть, что все собственные значения энергии в этой части спектра тоже не вырождены. Для этого достаточно заметить, что для приведенного выше (для дискретного спектра) доказательства достаточно, чтобы функции ψ_1 и ψ_2 обращались в нуль хотя бы на одной из бесконечностей (в данном случае они обращаются в нуль при $x = -\infty$).

Наконец при $E > U_0$ спектр будет непрерывным, а движение инфинитным в обе стороны. В этой части спектра все уровни двукратно вырождены. Это следует из того, что соответствующие волновые функции определяются уравнением второго порядка (21,1), причем оба независимых решения этого уравнения удовлетворяют должным условиям на бесконечности (между тем как, например, в предыдущем случае одно из решений обращалось при $x \rightarrow -\infty$ в бесконечность и потому должно было быть отброшено). Асимптотический вид волновой функции при $x \rightarrow +\infty$ есть

$\psi = a_1 e^{ikx} + a_2 e^{-ikx}$; и аналогично для $x \rightarrow -\infty$. Член с e^{ikx} соответствует частице движущейся вправо, а член с e^{-ikx} — влево

7. Гармонічний осцилятор (одно та тривимірний).

Потенціальна енергія лінійного осцилятора: $U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$; р-ня Шредінгера: $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar} \left\{ E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right\} \psi(x) = 0$; Позначимо $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$, $\varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$. В цих позначеннях: $\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} + \{\varepsilon - \xi^2\}\psi(\xi) = 0$. Асимптотичний розв'язок при $\xi \rightarrow \pm\infty$ шукаємо у вигляді $\psi_\infty(\xi) = A_\alpha e^{\alpha\xi^2}$; підставляємо в рівняння і врахуємо, що $\xi \gg \alpha$, маємо $\alpha = \pm 1/2$. $\alpha = 1/2$ відкидаємо. Маємо $\psi_\infty(\xi) = A_{-1/2} e^{-\xi^2/2}$. Загальний розв'язок шукаємо у вигляді: $\psi(\xi) = C f(\xi) e^{-\xi^2/2}$. Звідси $\frac{d^2 f(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi \frac{df(\xi)}{d\xi} + (\varepsilon - 1)f(\xi) = 0$. Розв'язок представимо у вигляді ряду по степенях ξ : $f(\xi) = \sum_{s=0}^{\infty} a_s \xi^s$. Підставляючи, отримуємо рекурентну ф-лу: $a_{s+2} = \frac{2s+1-\varepsilon}{(s+1)(s+2)} a_s$, тобто є 2 незалежних розв'язків для парних і непарних s . При $\xi \rightarrow \pm\infty$: $f(\xi) \rightarrow e^{\xi^2}$, ψ -я розходиться, отже не може бути власною. Щоб ψ -я $f(\xi)$ була скінченною, треба, щоб хоча б один з коефіцієнтів ряду $= 0$. При виконанні умови $\varepsilon = 2n + 1$, $n \in \mathbb{Z}_+$ розв'язок можна предстанити у вигляді поліномів Ерміта: $H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$. Остаточний вигляд власної хвильової функції $\psi_n(\xi) = C_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}$. $C_n = \sqrt{\frac{1}{x_0 n! 2^n \sqrt{\pi}}}$; власні значення енергії гармонічного осцилятора $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$. З цього результату можна зробити 2 важливі висновки:

енергія осцилятора не може бути нульовою (при ненульовій власній частоті); збудження додає до енергії величину кратну $\hbar\omega$ (квантування енергії)

8. Постулати квантової механіки.

Зображення фізичних величин лінійними самоспряженими операторами. Їх властивості.

Постулати:

1. Кожному стану фізичної системи відповідає функція стану(хвильова ф-я) $\Psi(q)$, яка з максимально можливою повнотою описує цей стан. Нічого іншого, окрім того, що містить хвильова ф-я, ми не можемо знати про цю ситсему.
2. Кожній фізичній величині у квантовій механіці ставиться у відповідність лінійний самоспряжений(ермітовий) оператор \hat{L} .
3. Співвідношення між конкретною фізичною величиною L та її оператором \hat{L} визначається з умови рівності експериментально виміряного середнього значення цієї величини в даній системі і розрахованого середнього значення (розрахованого математичного очікування), яке визначається дією
$$\langle L_{\text{експ}} \rangle \Leftrightarrow \langle L_{\text{експ}} \rangle = \int \Psi^* \hat{L} \Psi dq$$

Зображення фізичних величин лінійними самоспряженими операторами. Їх властивості

Конкретній фізичній величині L ставиться у відповідність оператор \hat{L} , а процедура зміни стану фізичної системи $\Psi(q)$ під дією цього оператора з перетворенням її на інший стан $\varphi(q)$ зображається рівнянням $\hat{L}\Psi(q) = \varphi(q)$. Оператор – сукупність матем.правил, дій, процедур, операцій, за допомогою якиходній ф-ї (Ψ) ставиться у відповідність інша (φ).Кожній фіз.величині можна поставити у відповідність єдиний оператор, отже, явний вид цього оператора може бути визначений у простій фізичній системі, а далі використаний без обмежень. Оператор є лінійним, якщо:

$\hat{L} \sum_n c_n \Psi_n(q) = \sum_n c_n \hat{L} \Psi_n(q)$. Оператори можна додавати/віднімати, множити. Сума двох або більшої кількості операторів $\hat{L} = \sum_k \hat{L}_k$ визначається з умови однакової дії суми операторів $\sum_k \hat{L}_k$ і сумарного оператора \hat{L} на одну й ту саму ф-ю $\hat{L}\Psi(q) = \sum_k \hat{L}_k \Psi(q)$. Множення операторів $\hat{L} = \hat{L}_n \hat{L}_m \dots \hat{L}_k$ визначається як процедура послідовної дії операторів $\hat{L}_n, \hat{L}_m, \dots \hat{L}_k$, починаючи з того \hat{L}_k , який розташований безпосередньо перед функцією $\Psi(q)$ і діє на неї:

$[\hat{L}\hat{M}]\hat{L}\Psi(q) = \hat{L}_n(\hat{L}_m(\dots(\hat{L}_k\Psi(q)))) = \hat{L}_n\hat{L}_m \dots \hat{L}_k\Psi(q)$. Комутатор операторів: $[\hat{L}\hat{M}] = (\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L})$. Якщо $\hat{L}\hat{M} = 0$ – оператори комутуючі, інакше ні.Процедури ділення на оператор не існує

Поняття та властивості стану

Якщо в деякому стані певні фіз. величини можна виміряти одночасно і при цьому вони мають конкретні (власні) значення то набір таких величин будемо називати *повним*.

Повний опис стану в квант мех. Виникає в результаті одночасного виміру повного набору фіз. величин. Під станом ми будемо розуміти стан які можна описати повним чином. Див постулат 1.

Власні функції та власні значення оператора. Функції від операторів.

Значення які може приймати певна фіз. величина наз. власними значеннями. Власні значення фіз. величини утв спектр власних зн. (дискретний або неперервний)

Позначимо хв. функцію стану, в якому фіз. величина має значення f_n , через Ψ_n - *власні функції*. Для них в загальному випадку вик умова нормування: $\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi_n|^2 = 1$. Як наслідок принципу суперпозиції маємо: $\Psi = \sum_n C_n \Psi_n$ Де також $\sum_n |C_n|^2 = 1$ Отже, $C_n C_n^* = \int \Psi \Psi^* dq$ З іншого боку $\int \Psi \Psi^* dq = \sum_n C_n^* \int \Psi^* \Psi dq$ Маємо: $\sum_n C_n C_n^* = \sum_n C_n^* \int \Psi^* \Psi dq$. Звідки $C_n = \int \Psi_n^* \Psi dq$. $C_n = \sum_m C_m \int \Psi_m \Psi_n^* dq$. Отже $\int \Psi_m \Psi_n^* dq = \delta_{nm}$. Отже, система власних функцій повна та ортонормована. Введемо поняття **середнього значення** \bar{f} величини f . Очевидно, що це сума всіх власних значень помножених на їх ймовірність: $\bar{f} = \sum_n f_n |a_n|^2$. Введемо оператор \hat{f} величини f таким чином: $\bar{f} = \int \Psi^* (\hat{f} \Psi) dq$ Очевидно, що $(\hat{f} \Psi) = \sum_n C_n f_n \Psi_n$ Таким чином кожній фіз. величині можна співставити певний лінійний оператор (постулат 2). Видно що якщо ф-ія $\Psi = \Psi_n$ тобто є власно, то $\hat{f} \Psi_n = f_n \Psi_n$ Тобто для знаходження власних власних функцій системи необхідно вирішити р-ня $\hat{f} \Psi = f \Psi$.

Наслідки 3-го постулата

Враховуючи 2-ий постулат, маємо, що оператор фіз. величини має бути

самоспряженим (ермітовим): $\int_V \Psi_n^*(q) \hat{L}(q) \Psi_m(q) dq = \int_V \Psi_m(q) \hat{L}(q) \Psi_n^*(q) dq$

Отже, середні та власні значення будь_якої фіз. величини, які обчислюються у квантовій механіці за допомогою операторів, будуть дійсними тільки при виконанні вищезгаданої формули. Ця вимога є необхідною, адже виміряні експериментально середні та власні значення завжди є дійсними. Завдяки даній формулі середні значення, які обчислюють за формулою в 3 постулаті є дійсними, для чого необхідне виконання рівності $\langle L \rangle = (\langle L \rangle)^*$, що можливе лише при виконанні умови самоспряженості.

13. Оператор похідної фізичної величини. Закон зміни операторів з часом. (рівняння руху для операторів)

Оператор – це сукупність математичних правил, дій, процедур, операцій, за допомогою яких одній функції ставиться у відповідність інша. Кожній фізичній величині можна поставити у відповідність єдиний оператор, який визначений у простій фізичній системі і далі використовується без обмежень. В математичному

апараті квантової механіки хвильова функція $\Psi(\vec{r}, t)$ та оператор \hat{L} є головними об'єктами для розрахунків. Нестационарне рівняння Шредінгера – це рівняння руху хвильової функції, яке дозволяє досліджувати її еволюцію. Аналогічно для дослідження еволюції операторів можна отримати рівняння руху для них. Введемо оператор конкретної фізичної величини $L(q, t) \rightarrow \hat{L}(q, t)$. Середнє значення оператора обчислюється за допомогою співвідношення $\langle L(t) \rangle = \int \Psi^*(q, t) \hat{L}(q, t) \Psi(q, t) dq$.

Візьмемо похідну по часу від $\langle L(t) \rangle$

$\frac{d\langle L \rangle}{dt} = \int \left\{ \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \hat{L} \Psi + \Psi^* \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \Psi + \Psi^* \hat{L} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\} dx$. Похідні хвильових функцій, що містяться в підінтегральному виразі замінимо виразами. Які відповідають нестационарному рівнянню Шредінгера $\frac{d\Psi}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \Psi$, $\frac{d\Psi^*}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H}^* \Psi^*$. Після заміни отримуємо рівняння $\frac{d\langle L \rangle}{dt} = \int \Psi^* \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \Psi dq + \frac{1}{i\hbar} \left\{ \int \Psi^* \hat{L} \hat{H} \Psi dq - \int (\hat{H}^* \Psi^*) \hat{L} \Psi dq \right\}$. Перетворимо його до вигляду

$\frac{d\langle L \rangle}{dt} = \int \Psi^* \left\{ \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} (\hat{L} \hat{H} - \hat{H} \hat{L}) \right\} \Psi dq$ (*). Це рівняння дозволяє знайти величину $\frac{d\langle L \rangle}{dt}$, яка є похідною від середнього значення $L(q, t)$ у даному стані. З іншого боку, якби нам був відомий оператор $\frac{d\hat{L}}{dt}$, то можна було б знайти середнє значення похідної від тієї самої величини $L(q, t)$: $\langle \frac{dL}{dt} \rangle = \int \Psi^* \frac{d\hat{L}}{dt} \Psi dq$ (**). Оскільки в рівняннях (*) та (**) операції усереднення за координатою та диференціювання за часом належать до різних незалежних змінних, то можна їх міняти місцями, що відповідає умові: $\langle \frac{dL}{dt} \rangle = \frac{d\langle L \rangle}{dt}$ (***). З рівності лівих частин (**) та (***) випливає співвідношення $\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{L} \hat{H}]$, яке є рівнянням руху оператора $\hat{L}(q, t)$.

14. Теорема Еренфеста. Квантові рівняння Ньютона.

Рівняння руху для найбільш простих операторів - \hat{x} і \hat{p}_x . Ці оператори не містять у явному вигляді час, для них $\frac{\partial \hat{x}}{\partial t} = 0$ і $\frac{\partial \hat{p}_x}{\partial t} = 0$, а рівняння руху мають загальний вигляд $\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{x} \hat{H}]$, $\frac{d\hat{p}_x}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{p}_x \hat{H}]$.

Виходячи з явного вигляду операторів $\hat{x} = x$ і $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, а також вигляду оператора Гамільтона $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x)$, легко знайти відповідні комутатори $[\hat{x} \hat{H}] = \frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial}{\partial x}$, $[\hat{p}_x \hat{H}] = -i\hbar \frac{\partial V}{\partial x}$, а також отримати рівняння руху для оператора координати $\frac{d\hat{x}}{dt} = -\frac{i\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x} \equiv \frac{\hat{p}_x}{m}$, $\frac{d\hat{p}_x}{dt} = \hat{v}_x$ (*)

та імпульсу $\frac{d\hat{p}_x}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial x} = \hat{F}_x$. (**)

Ми ввели оператор швидкості $\frac{d\hat{x}}{dt} = \hat{v}_x$ та оператор сили $\hat{F}_x = -\frac{\partial V}{\partial x}$. вони є повними аналогами відповідних виразів для швидкості та сили в класичній фізиці. Рівняння (*) та (**) за своєю структурою є повним аналогом рівнянь Гамільтона з класичної механіки. Їх називають ТЕОРЕМОЮ ЕРЕНФЕСТА і на їх основі встановлюють правило побудови квантових рівнянь руху методом заміни відповідних класичних виразів їх операторними аналогами. Якщо провести усереднення цих рівнянь, то отримаємо рівняння для середньої швидкості $\langle v_x \rangle = \frac{\langle \hat{p}_x \rangle}{m}$ (*а) та імпульсу $\frac{d\langle p_x \rangle}{dt} = \langle F_x \rangle$ (*а), які збігаються з відповідними класичними рівняннями. Отримані результати та явний вигляд рівнянь (*), (**) та (*а), (**а) дають наочну відповідь на питання, які виникають при вивченні квантової механіки:

1. які з рівнянь є більш загальними – рівняння Шредінгера з квантової механіки чи р-ня Ньютона, або рівноцінні їм рівняння Гамільтона з класичної механіки?

2. чи можна з р-ня Шредінгера отримати р-ня Ньютона? Очевидно, що з рівнянь квантової механіки безпосередньо отримують р-ня класичної механіки, зокрема з р-ня Шредінгера можна отримати р-ня Ньютона та Гамільтона.

15. Інтеграли руху в квантовій механіці - випадки однорідних, центрально- та аксиально-симетричних полів.

Інтегралами руху в квантовій фізиці називаються величини, які не змінюються у часі.

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = 0$$

значення: В КМ оператор \hat{L} називається інтегралом руху, якщо $\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{L}\hat{H}] = 0$ розглянемо випадок однорідних полів ($V = const$).

1) $\hat{p}_x \frac{\partial \hat{p}_x}{\partial t} = 0$ тому питання чи є \hat{p}_x інтегралом руху визначає комутатор $[\hat{p}_x \hat{H}]$

$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m} + V$ \hat{p}_x комутує з $\hat{p}_x^2, \hat{p}_y^2, \hat{p}_z^2$ та з V тому \hat{p}_x - інтеграл руху (закон збереження імпульсу)

2) \hat{H} - комутує сам із собою – закон збереження енергії. центрально- та аксиально-симетричних полів.

В цьому випадку хід думок такий само як і у випадку однорідних та центрально симетричних полів.

Введемо оператор моменту кількості руху: $\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ \hat{p}_x & \hat{p}_y & \hat{p}_z \end{vmatrix}$ Тоді легко показати,

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

що $[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x$ Оскільки у нас центральна симетрія, то перейдемо до сферичних

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

$$x = r \sin \theta \cos \phi$$

координат: $y = r \sin \theta \sin \phi$

$$z = r \cos \theta$$

$$\hat{L}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y = i\hbar \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

$$\text{Тоді } \hat{L}_y = -i\hbar \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

$$\hat{L}_z = i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$\text{Тоді } \hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]$$

Запишемо вираз для кінетичної енергії:

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hbar^2}{2mr^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2}$$

$$\text{Відповідно функція Гамільтона: } \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + \hat{V}$$

Знайдемо інтеграли руху:

а) L^2 : $[\hat{L}^2, \hat{H}] = 0$ - зберігається квадрат моменту кількості руху) E : - зберігається. $[\hat{E}, \hat{H}] = 0$

в) L_z можна показати, що $[\hat{L}_z, \hat{H}] = 0$, але в силу співвідношення невизначеності:

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_k, \quad i \neq j \quad \text{Ми не можемо точно знайти одночасно } L_x, L_y \text{ та } L_z.$$

Вихід: прийняти наприклад L_z інтегралом руху.

16. Рух частинки у центральному симетричному полі. Стаціонарні стани в сферичних координатах.

Однією з важливих задач квантової механіки є задача про атом. Нагадаємо, що проблема механіки атома була однією з проблем, розв'язання яких обумовило створення квантової механіки.

Найпростіший атом – атом гідрогену – складається з ядра та електрона, потенціальна енергія електростатичної взаємодії між якими $U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ залежить лише від відстані

між ними. Така взаємодія називається центральносиметричною, або центральною. Зауважимо, що не всяка взаємодія є центральною. Так, гравітаційна взаємодія теж належить до центральних, але, наприклад, ядерна (сильна) взаємодія – центральна, оскільки, крім відстані, вона залежить ще й від інших чинників.

Стаціонарні стани в сферичних координатах.

Необхідно розв'язати стаціонарне р-ня Шредінгера:

$$H\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (1)$$

для того, щоб знайти власні функції ψ_1, ψ_2 скористаємося функцією Гамільтона:

$$H = \hat{T}_r + U(\vec{r}) \quad (2)$$

де $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ запишемо потенціальну енергію:

$$\hat{T}_r = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) = -\frac{\hbar}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) = -\frac{\hbar}{2m}\Delta \quad (3)$$

В зв'язку з тим, що потенціальна енергія залежить тільки від відстані, то р-ня (1) зручно розв'язати у сферичних координатах. $x = r \sin \theta \cos \varphi$, $y = r \sin \theta \sin \varphi$, $z = r \cos \theta$. Лапласіан в сфер. координатах:

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta, \varphi} \quad (4)$$

$$\Delta_{\theta, \varphi} = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (5)$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\theta, \varphi} \quad (6).$$

В сфер. координатах Гамільтоніан (2) набуде вигляду :

$$\hat{T}_r = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \quad (7)$$

$$\tilde{U}(r) = U(r) - \frac{\hbar^2}{2mr^2} \Delta_{\theta,\varphi} = U(r) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} \quad (8)$$

$$H = \tilde{T}_r + \tilde{U}(r), \quad 0 \leq r < \infty, \quad 0 \leq \theta \leq \pi, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi$$

Із структури Гамільтоніана H випливає, що розв'язок можна шукати у вигляді похідної двох функцій, одна з яких залежить тільки від відстані, а друга тільки від кутів.

$$\psi(\vec{r}) = R(r)I(\theta, \varphi) \quad (9)$$

Оператори H і \hat{L}^2 комутують $[H, \hat{L}^2] = 0$. В обох операторах H і \hat{L}^2 є спільні хвильові ф-ції. Спільними можуть бути тільки ф-ції які залежать від кутів. Знайдемо власну ф-цію оператора

$$L^2: \hat{L}^2 I(\theta, \varphi) = L^2 I(\theta, \varphi) \quad (10).$$

Для цього скористаємось явним виглядом (6) і (5). Розв'язки цього р-ня добре відомі: $-\hbar^2 \Delta_{\theta,\varphi} I(\theta, \varphi) = L^2 I(\theta, \varphi)$ Розв'язком є будь-яка із сферичних ф-цій:

$I(\theta, \varphi) = Y_{lm}(\theta, \varphi), l = 0, 1, 2, \dots; m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ Явний вигляд сферичної ф-ції:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(l-|m|)!(2l+1)}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\xi) \cos \theta e^{im\varphi} \quad (11)$$

де $P_l^{|m|}(\xi) = (1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{d\xi^{|m|}} P_l(\xi), \xi = \cos \theta$ (12) – поліном Лежандра. Ф-ція (11) задовольняє

умові ортонормованості $\left\{ P_l(\xi) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d\xi^l} (1-\xi^2)^l \right\}$ (12)

$$\int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{l,m}(\theta, \varphi) Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (13).$$

l, m – називаються орбітальним і магнітним квантовими числами. Ф-ція (11) є також

власною для оператора проекції орбітал. моменту L_z : $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$

$$\hat{L}_z Y_{l,m}(\theta, \varphi) = L_z Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (14)$$

$$L_z = \hbar m, m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l \quad Y_{l,m} \text{ є власною ф-цією } \hat{L}^2 \text{ і } \hat{L}_z : L^2 = \hbar^2 l(l+1) \quad (15).$$

В результаті виконуються дві умови: $\begin{cases} -\hbar^2 \Delta_{\theta,\varphi} Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{l,m}(\theta, \varphi) \\ \hat{L}_z Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{l,m}(\theta, \varphi) \end{cases} \quad (16).$

19. Рух частинок в кулонівському потенціальному полі.

У випадку центрального кулонівського поля отримаємо р-ня для радіальної частини

$$\frac{d^2X}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2}X + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + \frac{ze^2}{r} \right] X = 0 \quad \rho = \frac{r}{a}, \quad a = \frac{\hbar^2}{ml^2}, \quad \varepsilon = \frac{E}{E_1}, \quad E = \frac{me^4}{\hbar^2} = \frac{e^2}{2a}$$

проведемо заміну для E: $\frac{2m}{\hbar^2} E \frac{a^2}{a^2} = \frac{1}{a^2} \frac{2m}{\hbar^2} E \frac{\hbar^4}{m^2 e^4} = \frac{E}{e^2/2a} = \varepsilon$, $\frac{ze^2}{r} = \frac{2z}{\rho}$, підставимо дані заміни

в ρ -ня: $\frac{1}{a^2} \frac{d^2X}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{a^2 \rho^2} + \varepsilon + \frac{2z}{\rho} = 0$ тобто $\frac{d^2X}{d\rho^2} + \left(\varepsilon + \frac{2z}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) X = 0$. Шукаємо розв'язок у

вигляді: $X(\rho) = e^{-\lambda \rho a} \rho^{l+1} f(\rho) = e^{-\alpha \rho} \rho^{l+1} f(\rho)$, де $\alpha = \sqrt{-\varepsilon}$. Знайдемо похідну

$$\frac{dX}{d\rho} = -\alpha e^{-\alpha \rho} \rho^{l+1} f(\rho) + e^{-\alpha \rho} (l+1) \rho^l f(\rho) + e^{-\alpha \rho} \rho^{l+1} \frac{df}{d\rho}, \quad \frac{d^2X}{d\rho^2} = \alpha^2 e^{-\alpha \rho} \rho^{l+1} f(\rho) - \alpha(l+1) e^{-\alpha \rho} \rho^l f(\rho)$$

$$+ \alpha e^{-\alpha \rho} \rho^{l+1} \frac{df}{d\rho} - \alpha(l+1) e^{-\alpha \rho} \rho^l f(\rho) + (l+1) e^{-\alpha \rho} \rho^l \frac{df}{d\rho} - \alpha e^{-\alpha \rho} \rho^{l+1} \frac{df}{d\rho} +$$

$$(l+1) e^{-\alpha \rho} \rho^l \frac{df}{d\rho} + e^{-\alpha \rho} \rho^{l+1} \frac{d^2f}{d\rho^2} \Rightarrow$$

$$\rho \frac{d^2f}{d\rho^2} + 2(l+1-\alpha\rho) \frac{df}{d\rho} + 2[z-\alpha(l+1)]f = 0 \quad (\alpha\rho = z). \text{ Шукаємо розв'язок у вигляді ряду:}$$

$$f(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k,$$

$$\frac{d}{d\rho} = \sum_{k=0}^{\infty} k a_k \rho^{k-1}, \quad \frac{d^2}{d\rho^2} = \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) a_k \rho^{k-2}, \text{ підставимо у } \rho\text{-ня: } \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) a_k \rho^{k-2} + 2(l+1) \sum_{k=0}^{\infty} k a_k \rho^{k-1} - 2\alpha \sum_{k=0}^{\infty} k a_k \rho^{k+1} +$$

$$[2z - 2\alpha(l+1)] \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k = 0 \quad \text{заміна} \quad k = m+1 \quad \sum_{m=0}^{\infty} (m+1) m a_{m+1} \rho^m + 2(l+1) \sum_{m=0}^{\infty} (m+1) a_{m+1} \rho^m -$$

$$2\alpha \sum_{k=0}^{\infty} k a_k \rho^k + [2z - 2\alpha(l+1)] \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k = 0 \quad \text{зберемо коефіцієнти при } \rho^k: \sum_{k=0}^{\infty} \rho^k \{ a_{k+1} [k(k+1) + 2(k+1)(l+1)] -$$

$$a_k [2z - 2\alpha(l+1) - 2\alpha k] \} = 0 \quad \text{Ряд} = 0 \text{ коли коефіцієнти} = 0, \text{ тобто отримуємо рекурентне}$$

$$\text{співвідношення: } a_{k+1} = \frac{2\alpha \left[k + l + 1 - \frac{z}{\alpha} \right]}{k(k+1) + 2(k+1)(l+1)} a_k \quad \text{коли } \rho \rightarrow \infty \Rightarrow f(\rho) \sim \exp(2\alpha\rho) \quad \text{дійсно } \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{a_{k+1}}{a_k} = \frac{2\alpha}{k}.$$

Такий розв'язок нас не задовольняє як ф-ція, але задовольняє як поліном. Якщо при

$$k = n_r \text{ ряд обривається (хоча б один з } a_k = 0) \text{ знайдемо } n_r: n \equiv n_r + l + 1 = \frac{z}{\alpha} = \frac{z}{\sqrt{-\varepsilon}}, \text{ де } n -$$

головне квантове число. $\varepsilon = -\frac{z^2}{n^2}$ $E = -\frac{z^2 m e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$ - спектр водневоподібних атомів. Кожному

n відповідає $l = n-1$, випадкове кулонівське пов'язане з існуванням ще одного інтеграла руху. Підрахуємо кратність загального виродження: $\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$. Запишемо

радіальну ф-цію для кулонівського поля: $\int_0^\infty R^2(r)r^2 dr = 1$ - умова нормування.

$$R_{nl}(r) = -\left(\frac{2z}{na}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n((n+1)!)^3}} \left(\frac{2z}{na}r\right)^l \exp\left(-\frac{zr}{na}\right) L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2zr}{na}\right), \text{ де } L_{n-l-1}^{2l+1} - \text{узагальнений поліном Лягера.}$$

$$R_{10}(r) = 2\left(\frac{z}{a}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{zr}{a}\right),$$

$$R_{20}(r) = \left(\frac{z}{2a}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{2r}{a}\right) \exp\left(-\frac{zr}{2a}\right) \text{ Підсумок:}$$

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = C_{nlm} R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad \text{спектр для неї} \quad E_n = -\frac{z^2 e^4 m}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

20. Теорія атома водню та водневоподібних атомів. Задача двох тіл у квантовій механіки.

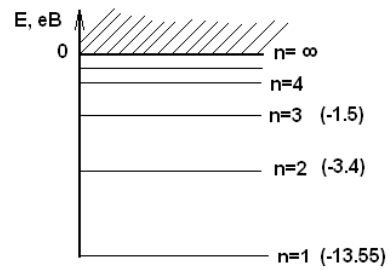
Випадки дискретного та неперервного спектрів.

Для атома гідрогену $Z=1$, тому на підставі

$$E_n = -\frac{m_0 Z^2 e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 n^2}, n=1,2,3,\dots$$

енергія електрона в

$$\text{електрон-вольтах} \quad E_n = -\frac{m_0 Z^2 e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 n^2} = -\frac{13.55}{n^2} \quad (30).$$



Відповідні рівні енергії атома гідрогену зображені на рис. Заштрихована область – неперервний спектр кінетичної енергії вільного електрона, що утворюється внаслідок іонізації атома. Хвильові ф-ції електрона (атома) обчислюється за формулою

$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) = R_{nl}(r) A_l^{|m|} P_l^{|m|}(\cos\theta) e^{im\varphi}$ (***) при $Z=1$. Вони повністю визначаються квантовими числами n, l, m ; тому ця трійка квантових чисел (або відповідно величини E_n, L^2, L_z) утворюють повний набір фізичних величин. Енергія E_n залежить лише від головного квантового числа n , а хвильові ф-ції – від квантових чисел n, l, m , тому певному значенню енергії E_n (власному значенню оператора Гамільтона \hat{H}) відповідає кілька хвильових ф-цій (власних ф-цій оператора \hat{H}). Це явище назив. виродженням власних значень оператора, у цьому разі – рівнів енергії.

При заданому n квантове число l набуває значень $0 \dots n-1$, а при заданому l магнітне квантове число m має $2l+1$ значень. Отже кратність виродження рівня

$$\text{енергії } E_n \text{ становить: } f = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \quad (31). \text{ Хвильова ф-ція визначає імовірність}$$

місцезнаходження частинки: ймовірність виявити частинку в об'ємі dV , взятому в

точці з координатою \vec{r} , становить: $d\omega(\vec{r}) = |\Psi(\vec{r})|^2 dV$. Для електрона атома гідрогену, враховуючи (**), дістанемо $d\omega_{nlm}(r, \theta, \varphi) = |R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 r^2 dr d\Omega = R_{nl}^2(r) r^2 dr |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega$.

Функція $\omega_{nl}(r) = R_{nl}^2(r) r^2$ (32) визначає радіальний розподіл імовірності. Вона є лінійною густиною імовірності, тобто дорівнює імовірності виявити електрон на відстані r від ядра на одиничному інтервалі довжини. Ф-ція $\omega_{lm}(\theta) = |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2$ (33) є кутовою густиною імовірності, що описує кутовий розподіл імовірності й дорівнює імовірності виявити електрон у напрямі, який утворює кут θ з віссю z усередині одиничного тілесного кута.

Траєкторія електрона в атомі відсутня, тому його рух моделюють за допомогою електронної хмари, густина якої = густині імовірності $d\omega_{nlm}/dV$. Форма електронної хмари визначається ф-ціями (32) і (33). Якщо атом знаходиться в основному стані ($n=1, l=m=0$), то відповідно до

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = A_l^{lm} \frac{r^l}{r^l} (\cos\theta) e^{im\varphi} \quad \text{де} \quad A_l^{lm} = \sqrt{\frac{(l-|m|)!(2l+1)}{(l+|m|)!4\pi}} \quad \text{запишемо} \quad \omega_{00}(\theta) = |Y_{00}(\theta, \varphi)|^2 = \frac{1}{4\pi} = \text{const}$$

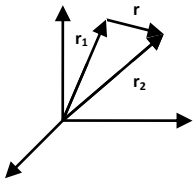
Це означає, що в основному стані електронна хмара – сферично-симетрична: імовірність виявити електрон однакова в усіх напрямках. Радіальний розподіл імовірності у цьому разі має вигляд: $\omega_{10}(r) = R_{10}^2(r) r^2 = \frac{4}{r_1^3} \exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right) r^2$ (34) графік якого

зображено на мал. Дослідивши ф-цію (34) на максимум, знайдемо, що максимальне значення ф-ції $\omega_{10}(r)$ відповідає відстані $r = r_1$. Таким чином, радіус першої борівської орбіти у квантовій механіці має зміст найімовірнішої відстані електрона від ядра в основному стані. Подібним способом можна довести, що при $n=2$ найімовірніша відстань $= 4r_1$, при $n=3$ вона становить $9r_1$. Стан Ψ_{200} теж сферично-

симетричний, але стани $\Psi_{210}, \Psi_{21\pm 1}$ не сферично-симетричні: $\omega_{10}(\theta) = \frac{3}{4\pi} \cos^2 \theta$,

$\omega_{1\pm 1}(\theta) = \frac{3}{8\pi} \sin^2 \theta$. У стані Ψ_{210} електрон найімовірніше виявити вздовж осі z , а в станах $\Psi_{21\pm 1}$ - у напрямі, перпендикулярному до осі z . Зауважимо, що в атомі немає виділеного напрямку, тобто виділеної осі z . Він з'являється, якщо атом знаходиться в зовнішньому полі, тоді вісь z вибирається вздовж поля. Тому за відсутності поля вісь z не виділяється, а отже кутовий розподіл імовірності невизначений, визначенням залишається лише радіальний розподіл. Із наведених вище міркувань випливає, що терміном „рух” електрона в атомі слід користуватися обережно, не вкладаючи в нього класичний зміст. Більш коректним у квантовій механіці є термін ”квантовий стан”. Для квантових станів електрона в атомі існують спеціальні (спектроскопічні)

позначення у вигляді n^l , причому замість n указують відповідне число, а замість l - літери $s(l=0)$, $p(l=1)$, $d(l=2)$, ... Наприклад, стан $1s$ означає, що $n=1, l=0$, стан $2p$, - що $n=2, l=1$ і т.д. Згідно з попередніми зауваженнями стани $n(2l+1)$ - кратно вироджені за магнітним квантовим числом m .



Задача двох тіл у квантовій механіці:

$$\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_2 + U(r_1 - r_2) \quad \text{перейдемо від } \vec{r}_1, \vec{r}_2$$

$$\text{до } \vec{r}, \vec{R} : \frac{\partial}{\partial x_{1,2}} = \frac{\partial X}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial X}{\partial x_2} \frac{\partial}{\partial X} = \frac{m_{1,2}}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial X}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_{1,2}^2} = \frac{m_1^2}{(m_1 + m_2)^2} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{2m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial X^2}, \text{ виконавши все це по усіх змінних то}$$

$$\text{отримаємо: } -\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \Delta_R - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + U(r) = \hat{H} \quad \hat{H}\psi(\vec{R}, \vec{r}) = E\psi(\vec{R}, \vec{r}), \quad \psi = \phi(\vec{R})\psi(\vec{r}),$$

$$\psi(r) \left(-\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \Delta_R \phi(R) \right) - \phi(R) \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r \psi(r) = E \phi \psi \quad \left| \frac{1}{\phi \psi} \right. \quad \left. -\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \Delta_R \phi = \alpha \phi(R) \right., \text{ де } \alpha = \frac{\hbar^2 p^2}{2(m_1 + m_2)},$$

$$\phi = \exp\left(\frac{\vec{p} \vec{r}}{\hbar}\right) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r \psi(r) + U(r) \psi(r) = (E - \alpha) \psi(\vec{r})$$

25. Хвильова функція с-ми в довільному представленні.

Розглянемо фізичну систему, яка описується хвильовою функцією $\Psi(x, t)$.

Розкладемо цю функцію за власними функціями $\Psi_n(x, t)$ оператора $\hat{A}(x)$ фізичної величини $A(x)$, яка задана в цій системі:

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n(t) \Psi_n(x), \quad \hat{A}(x) \Psi_n(x) = A_n(x) \Psi_n(x) \quad (1)$$

і за власними функціями $\Psi_\alpha(x)$ іншого оператора $\hat{B}(x)$ фізичної величини $B(x)$, яка також задана в цій системі:

$$\Psi(x, t) = \sum_\alpha c_\alpha(t) \Psi_\alpha(x), \quad \hat{B}(x) \Psi_\alpha(x) = B_\alpha(x) \Psi_\alpha(x) \quad (2)$$

Аналогічно для випадку коли власні функції $\Psi_p(x)$ оператора $\hat{P}(x)$ утворюють неперервний набір:

$$\Psi(x, t) = \int g_p(t) \Psi_p(x) dp, \quad \hat{P}(x) \Psi_p(x) = P_p(x) \Psi_p(x) \quad (3)$$

Проінтегруємо $(\Psi(x, t) * \Psi^*(x, t))$ по вісї області існування $\Psi(x, t)$, враховуючи ортогональність власних функцій. Взявши до уваги що $\int \Psi_n^*(x) \Psi_m(x) dx = \delta_{nm}$, а

для функцій, які відповідають неперервному спектру - $\int \Psi_n^*(x) \Psi_m(x) dx = \delta(p - p^*)$, (де δ_{nm} – символ Кронекера, а $\delta(p - p^*)$ – дельта-функція Дірака) з (1)-(3) отримаємо систему еквівалентних рівнянь:

$$\begin{aligned} 1 &= \int |\Psi(x, t)|^2 dx = \sum_n \sum_m c_n^*(t) c_m(t) \int \Psi_n^*(x) \Psi_m(x) dx = \sum_n |c_n(t)|^2, \\ 1 &= \int |\Psi(x, t)|^2 dx = \sum_\alpha \sum_\beta b_\alpha^*(t) b_\beta(t) \int \Psi_\alpha^*(x) \Psi_\beta(x) dx = \sum_\alpha |b_\alpha(t)|^2, \\ 1 &= \int |\Psi(x, t)|^2 dx = \iint g_p^*(t) g_{p'}(t) \{ \int \Psi_p^*(x) \Psi_{p'}(x) dp dp' \} = \int |g_p(t)|^2 dp \end{aligned}$$

Повторюючи цю процедуру з використанням операторів різних величин, можна утворити ланцюжок рівностей:

$$1 = \int |\Psi(x, t)|^2 dx = \sum_\alpha |b_\alpha(t)|^2 = \sum_n |c_n(t)|^2 = \int |g_p(t)|^2 dp = \dots, \quad (4)$$

Рівність $1 = \int |\Psi(x, t)|^2 dx$ має зміст повної ймовірності перебування частинки де-небудь у просторі. Зміст рівності $\sum_n |c_n(t)|^2 = 1$ - повна ймовірність реалізації хоча б одного з можливих значень величини A_n рівна 1. А $\int |g_p(t)|^2 dp = 1$ – ймовірність реалізації будь-якого конкретного значення величини P_p , яка розподілена неперервно.

При розкладі функції за будь-якими з повних наборів взаємно ортогональних функцій уся інформація про властивості системи, яка містилась у $\Psi(x, t)$, тепер міститься в наборі дискретних $c_n(t)$ або неперервних $g_p(t)$ коефіцієнтів. Таким чином $c_n(t)$ та $g_p(t)$ це відповідно А та Р представлення хвильової функції $\Psi(x, t)$.

26. Оператор фізичної величини в довільному представленні.

Розглянемо фізичну систему, яка описується хвильовою функцією $\Psi(x, t)$.

Розкладемо цю функцію за власними функціями $\Psi_n(x, t)$ оператора $\hat{A}(x)$ фізичної величини $A(x)$, яка задана в цій системі:

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n(t) \Psi_n(x), \quad \hat{A}(x) \Psi_n(x) = A_n(x) \Psi_n(x) \quad (1)$$

і за власними функціями $\Psi_\alpha(x)$ іншого оператора $\hat{B}(x)$ фізичної величини $B(x)$, яка також задана в цій системі:

$$\Psi(x, t) = \sum_\alpha c_\alpha(t) \Psi_\alpha(x), \quad \hat{B}(x) \Psi_\alpha(x) = B_\alpha(x) \Psi_\alpha(x) \quad (2)$$

Аналогічно для випадку коли власні функції $\Psi_p(x)$ оператора $\hat{P}(x)$ утворюють неперервний набір:

$$\Psi(x, t) = \int g_p(t) \Psi_p(x) dp, \quad \hat{P}(x) \Psi_p(x) = P_p(x) \Psi_p(x) \quad (3)$$

Проінтегруємо $(\Psi(x, t) * \Psi^*(x, t))$ по вісї області існування $\Psi(x, t)$, враховуючи ортогональність власних функцій. Взявши до уваги що $\int \Psi_n^*(x) \Psi_m(x) dx = \delta_{nm}$, а для функцій, які відповідають неперервному спектру - $\int \Psi_n^*(x) \Psi_m(x) dx = \delta(p - p^*)$, (де δ_{nm} – символ Кронекера, а $\delta(p - p^*)$ – дельта-функція Дірака) з (1)-(3) отримаємо систему еквівалентних рівнянь:

$$\begin{aligned} 1 &= \int |\Psi(x, t)|^2 dx = \sum_n \sum_m c_n^*(t) c_m(t) \int \Psi_n^*(x) \Psi_m(x) dx = \sum_n |c_n(t)|^2, \\ 1 &= \int |\Psi(x, t)|^2 dx = \sum_\alpha \sum_\beta b_\alpha^*(t) b_\beta(t) \int \Psi_\alpha^*(x) \Psi_\beta(x) dx = \sum_\alpha |b_\alpha(t)|^2, \\ 1 &= \int |\Psi(x, t)|^2 dx = \iint g_p^*(t) g_{p'}(t) \{ \int \Psi_p^*(x) \Psi_{p'}(x) dp dp' \} = \int |g_p(t)|^2 dp \end{aligned}$$

Повторюючи цю процедуру з використанням операторів різних величин, можна утворити ланцюжок рівностей:

$$1 = \int |\Psi(x, t)|^2 dx = \sum_\alpha |b_\alpha(t)|^2 = \sum_n |c_n(t)|^2 = \int |g_p(t)|^2 dp = \dots, \quad (4)$$

Рівність $1 = \int |\Psi(x, t)|^2 dx$ має зміст повної ймовірності перебування частинки де-небудь у просторі. Зміст рівності $\sum_n |c_n(t)|^2 = 1$ - повна ймовірність реалізації хоча б одного з можливих значень величини A_n рівна 1. А $\int |g_p(t)|^2 dp = 1$ – ймовірність реалізації будь-якого конкретного значення величини P_p , яка розподілена неперервно.

При розкладі функції за будь-якими з повних наборів взаємно ортогональних функцій уся інформація про властивості системи, яка містилась у $\Psi(x, t)$, тепер міститься в наборі дискретних $c_n(t)$ або неперервних $g_p(t)$ коефіцієнтів. Таким чином $c_n(t)$ та $g_p(t)$ це відповідно А та Р представлення хвильової функції $\Psi(x, t)$.

37. Принцип Паулі.

Паулі сформулював: у системі ферміонів у кожний момент часу в кожному стані, який визначається повним набором квантових чисел, не може бути більше одного ферміона. Якщо застосувати цей принцип до с-ми електронів у атомі, то впливає, що в будь-якому конкретному стані, який визначається 4 квантовими числами (n, l, m, m_s) або (n, l, j, m_j) у довільний момент часу не може бути більше одного електрона. Розг. с-му з 2 електронів (принцип Паулі – наслідок антисиметрії хвильової ф-ї $\Psi(q_1, q_2, t)$ для с-ми ферміонів), де оператор гамільтона $\hat{H}(q_i)$ для кожного з цих електронів, враховуючи їх взаємодію з ядром і не враховуючи – між собою. Власні ф-ї цих операторів визначають із с-ми р-нь: $\hat{H}(q_i) \Psi_{\tilde{n}_i}(q_i) = E_{\tilde{n}_i} \Psi_{\tilde{n}_i}(q_i)$ (1) де $\tilde{n}_i = \{ n_i, l_i, m_i, m_{s_i} \}$ - скорочене позначення сукупності 4 квантових чисел. Власні ф-ї р-ня (1) не описують стан електрона в атомі, але утворюють повний набір

ортогональних ф-й і для них справедливі умови: $\Psi_{\tilde{n}_1}'^*(q_1)\Psi_{\tilde{n}_1}(q_1)dq_1 = \delta_{\tilde{n}_1'\tilde{n}_1}$; $\Psi_{\tilde{n}_2}'^*(q_2)\Psi_{\tilde{n}_2}(q_2)dq_2 = \delta_{\tilde{n}_2'\tilde{n}_2}$ (2)

Розкладемо ф-ї всієї с-ми $\Psi(q_1, q_2, t)$ за добутком цих власних ф-й:

$$\Psi(q_1, q_2, t) = \sum_{\tilde{n}_1} \sum_{\tilde{n}_2} c(\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, t) \Psi_{\tilde{n}_1}(q_1) \Psi_{\tilde{n}_2}(q_2),$$

де $c(\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, t) = \iint \Psi(q_1, q_2, t) \Psi_{\tilde{n}_1}'^*(q_1) \Psi_{\tilde{n}_2}'^*(q_2) dq_1 dq_2$. А зміст величини:

$|c(\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, t)|^2 \equiv W(\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, t) \equiv W(n_1, l_1, m_1, m_{S1}; n_2, l_2, m_2, m_{S2}; t)$ – (3) характеризує ймовірність перебування першої частинки в момент часу t у стані з квантовими числами n_1, l_1, m_1, m_{S1} , а другої – у стані з n_2, l_2, m_2, m_{S2} . Поміняємо місцями 2 електрони, залишивши їх у тих самих станах:

$$\begin{aligned} \Psi(q_2, q_1, t) &= \sum_{\tilde{n}_1} \sum_{\tilde{n}_2} c(\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, t) \Psi_{\tilde{n}_1}(q_2) \Psi_{\tilde{n}_2}(q_1) \\ &= \sum_{\tilde{n}_2} \sum_{\tilde{n}_1} c(\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, t) \Psi_{\tilde{n}_2}(q_2) \Psi_{\tilde{n}_1}(q_1) \end{aligned}$$

З іншого боку, враховуючи, що $\Psi(q_2, q_1, t)$ є антисиметричною, то маємо:

$$\Psi(q_2, q_1, t) = -\Psi(q_1, q_2, t) = -\sum_{\tilde{n}_1} \sum_{\tilde{n}_2} c(\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, t) \Psi_{\tilde{n}_1}(q_2) \Psi_{\tilde{n}_2}(q_1)$$

Якщо зробити заміну $\tilde{n}_1 \leftrightarrow \tilde{n}_2$, то $\Psi(q_2, q_1, t) = \sum_{\tilde{n}_2} \sum_{\tilde{n}_1} c(\tilde{n}_2, \tilde{n}_1, t) \Psi_{\tilde{n}_2}(q_2) \Psi_{\tilde{n}_1}(q_1)$. Прирівнявши 2 останні ф-ли, маємо: $c(\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, t) = -c(\tilde{n}_2, \tilde{n}_1, t)$. Поклавши $\tilde{n}_1 = \tilde{n}_2$, отримуємо результат: $c(\tilde{n}_i, \tilde{n}_i, t) = -c(\tilde{n}_i, \tilde{n}_i, t)$ – згідно з яким ймовірність (3) того, що обидва електрони в один і той самий момент часу перебувають у одному й тому самому стані, дор. 0, тобто $W(\tilde{n}_i, \tilde{n}_i, t) = 0$ - цей результат доводить принцип Паулі, який лежить в основі фізики атомних і ядерних с-м.

38. Обмінна взаємодія.

Систематика та позначення енергетичних рівнів багатоелектронних атомів.

$$A = \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \Psi_{1s}^*(\vec{r}_1) \Psi_{2s}^*(\vec{r}_2) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \Psi_{1s}(\vec{r}_2) \Psi_{2s}(\vec{r}_1) - \text{ наз. обмінним інтегралом,}$$

який характеризує обмінну взаємодію і є наслідком тотожності частинок. Даний інтеграл є додатною величиною, це можна показати, якщо скористатися розкладом в

$$\text{ряд Фур'є оператора } \widehat{V} \left\{ \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \frac{1}{V} \sum_q \frac{4\pi e^2}{q^2} e^{iq(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} \right\}, \text{ тоді } A = \sum_q \frac{4\pi e^2}{q^2 V} |f_q|^2, \quad f_q =$$

$$\int d\vec{r} e^{iq\vec{r}} \Psi_{1s}(\vec{r}) \Psi_{2s}(\vec{r}), \text{ очевидно, що } A > 0 \}.$$

Припустимо, що електрони в атомі гелію не взаємодіють між собою і в деякий початковий момент часу $t=0$ 1 електрон знаходиться в стані $\Psi_{1s}(\vec{r}_1)$, а 2- у стані

$\Psi_{2s}(\vec{r}_2)$. Отже, початковий стан с-ми двох електронів $\Psi_1 = \Psi_{1s}(\vec{r}_1)\Psi_{2s}(\vec{r}_2)$, а її повна енергія дор. $E_{1s} + E_{2s}$. Враховуючи, між електронну взаємодію $\hat{V} = \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$ і не беручи до уваги всіх інших станів, знайдемо ймовірність переходу с-ми в стан $\Psi_2 = \Psi_{2s}(\vec{r}_1)\Psi_{1s}(\vec{r}_2)$ з тією ж енергією. Отже, тепер 1 електрон знаходиться в стані $\Psi_{2s}(\vec{r}_1)$, а 2- у стані $\Psi_{1s}(\vec{r}_2)$. Тобто шукаємо ймовірність того, що електрони обмінюються станами, де амплітуди $C_1 = C_1(t), C_2 = C_2(t)$ перебування с-ми в станах Ψ_1 та Ψ_2 маємо с-му :

$$i\hbar\dot{C}_1 = \hat{V}_{11}C_1 + \hat{V}_{12}C_2$$

$$i\hbar\dot{C}_2 = \hat{V}_{21}C_1 + \hat{V}_{22}C_2$$

Тут матричні елементи оператора збурення \hat{V} у представленні взаємодії не залежать від часу, оскільки енергії станів збігаються і частота переходу $\omega_{12} = 0$:

$$\hat{V}_{11} = V_{11} = \iint \Psi_{1s}(\vec{r}_2)\Psi_{2s}(\vec{r}_1)\frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\Psi_{2s}(\vec{r}_2)\Psi_{1s}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = K, \quad \hat{V}_{22} = V_{22} = V_{11} = K,$$

$$\hat{V}_{12} = V_{12} = \iint \Psi_{1s}(\vec{r}_1)\Psi_{2s}(\vec{r}_2)\frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\Psi_{2s}(\vec{r}_1)\Psi_{1s}(\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = A$$

$$\hat{V}_{21} = V_{21} = V_{12} = A$$

Розв'язок цієї с-ми р-нь з урахуванням умови нормування $|C_1|^2 + |C_2|^2 = 1$, при початкових умовах $t=0, C_1=1, C_2=0$ отримаємо просто і має вигляд:

$C_1 = e^{-\frac{i}{\hbar}Kt} \cos \Omega t, C_2 = -ie^{-\frac{i}{\hbar}Kt} \sin \Omega t$, де $\Omega t = \frac{A}{\hbar}$. Імовірності перебування електронів у двох станах: $|C_1|^2 = \cos^2 \Omega t, |C_2|^2 = \sin^2 \Omega t$, вони є осцилюючими ф-ми з частотою, яка визначається обмінним інтегралом А. С-ма, що в початковий момент часу є в стані Ψ_1 , через час $T = \frac{\pi}{2\Omega}$ переходить у стан Ψ_2 . Тобто електрони обмінюються станами з частотою $\frac{A}{\hbar}$ - звідси і назва А: обмінний інтеграл. Насправді проведений аналіз не можна сприймати серйозно. Оскільки електрони є тотожними частинками і їх не можна розрізнити, то вони обидва знаходяться в суперпозиційному стані в будь-який момент часу.

39. Спін-орбітальний зв'язок та його типи. Orest+

Векторне додавання кутових моментів.

Енергія взаємодії спінового магнітного моменту з орбітальним для електрона у воднеподібному атомі: $\hat{W} = -(\vec{H} \cdot \vec{M}_s)$, але $\vec{H} = \frac{[\vec{v} \times \vec{E}]}{c} = -\frac{\vec{L}}{\mu r c} \frac{dV}{dr}$. Тоді: $\hat{W} = \frac{1}{\mu^2 c^2 r} \frac{dV}{dr} \hat{L} \hat{S}$

Вводимо сумарний момент електрона: $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$

Власні значення оператора сумарного моменту та проекції на вісь апікат: $J^2 = \hbar^2 j(j+1)$,

$(\vec{S} \cdot \vec{L}) > 0 \rightarrow j = l + 0.5; (\vec{S} \cdot \vec{L}) < 0 \rightarrow j = |l - 0.5|$ $J_z = \hbar m_j, m_j = m \pm 0.5$

З означення J: $\hat{J}^2 = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L}\hat{S}$

Для воднеподібної системи: $V = -\frac{Ze^2}{r}$

Тоді: $\hat{W} = \frac{Ze^2 \hbar^2}{2\mu^2 c^2 r^3} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2) \rightarrow \langle \hat{W} \rangle = \frac{Ze^2}{2\mu^2 c^2} \langle r^{-3} \rangle \{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\}$

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{2}{a^3 n^3 l(l+1)(2l+1)}$$

Остаточний вираз: $\langle \hat{W} \rangle = R \frac{Z^4 \alpha^2}{n^3} \frac{\{j(j+1) - l(l+1) - 0.75\}}{l(l+1)(l+0.5)}$

44. Стаціонарне збурення. Випадки відсутності та наявності виродження.

Критерій застосування теорії збурень.

Критерій застосування теорії збурень.

Треба розв'язати рівняння Шреденгера для збудженої системи

$$\hat{H}(q)\psi(q) = E(q); \hat{H}(q) = \hat{H}_0(q) + \hat{V}(q)$$

Випадок відсутності виродження

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

Матричний елемент збурення $V_{nm} = \int \psi_m^*(q) \hat{V}(q) \psi_n(q) dq$.

Виділимо малий параметр $V_{nm} = \alpha \tilde{V}_{mn}; |\alpha| \ll 1$.

Розв'язок будемо шукати у вигляді:

$$E = E^{(0)} + \alpha E^{(1)} + \alpha^2 E^{(2)} \dots$$

$$c_n = c_n^{(0)} + \alpha c_n^{(1)} + \alpha^2 c_n^{(2)} \dots$$

Розв'язавши рівняння Шреденгера маємо

$$E^{(0)} = E_k; E^{(1)} = \tilde{V}_{kk}; E^{(2)} = \sum_{m \neq k} \frac{|\tilde{V}_{mk}|^2}{E_n - E_m}$$

$$c_m^{(0)} = \delta_{mk}; c_{m \neq n}^{(1)} = \frac{\tilde{V}_{mk}}{E_k - E_m}; c_k^{(1)} = 0; c_{m=n}^{(2)} = \sum_{n \neq k} \frac{\tilde{V}_{mn} \tilde{V}_{nk}}{(E_k - E_m)(E_k - E_n)} - \frac{\tilde{V}_{kk} \tilde{V}_{mk}}{(E_k - E_m)^2},$$

$$= -\frac{1}{2} \sum_{n \neq k} \frac{|\tilde{V}_{nk}|^2}{(E_k - E_n)^2}$$

Випадок наявності виродження

Нехай еталонна система є f -кратно вироджена.

$$\hat{H}_0(q) \psi_{n\alpha}(q) = E_n \psi_{n\alpha}(q); \alpha = 1, 2, 3, \dots f$$

$$\psi_n(q) = \sum_n c_{n\alpha} \psi_{n\alpha}(q)$$

Розв'язок будемо шукати в 1-ому наближенні

$$E = E^{(0)} + \alpha E^{(1)}$$

$$\psi(q) = \psi_n^{(0)} + \alpha \psi^{(1)}$$

Підставимо в рівняння Шреденгера та домножимо на $\psi_{n\beta}^*$

$$\int \psi_{n\beta}^*(q) \hat{H}_0(q) \psi^{(1)}(q) dq + \sum_{\alpha=1}^f a_{n\alpha} \tilde{V}_{n\beta, n\alpha} = E_n \int \psi_{n\beta}^*(q) \psi^{(1)}(q) dq + E^{(1)} a_{n\beta}$$

Це рівняння має розв'язок коли

$$\begin{bmatrix} E_n - E + V_{n1,n1} & V_{n1,n2} & \dots & V_{n1,nf} \\ V_{n2,n1} & E_n - E + V_{n2,n2} & \dots & V_{n2,nf} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ V_{nf,n1} & V_{nf,n2} & \dots & E_n - E + V_{nf,nf} \end{bmatrix} = 0$$

Звідси і знаходимо енергетичний спектр.

45. Конкретні приклади - лінійний та квадратичний ефекти Штарка, ангармонічний осцилятор, врахування скінченного розміру ядра в атомі водню, збурення форми та розміру потенціальних ям.

Квадратичний Ефект Штарка

Розглянемо вплив зовнішнього поля на атом водню в не збудженому стані

$V_z = \vec{d} \vec{\epsilon} = eZ\epsilon$; \vec{d} -дипольний момент атому.

$$E = E_{100} + V_{100,100} + \sum_{n=2}^{\infty} \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l \frac{|V_{100,nlm}|^2}{E_1 - E_n}$$

Порахувавши отримуємо $V_{100,100} = 0$

$$\sum_{n=2}^{\infty} \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l \frac{|V_{100,nlm}|^2}{E_1 - E_n} = -\alpha \epsilon^2; \alpha = \sum_{n=2}^{\infty} \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l \frac{|z_{100,nlm}|^2}{E_1 - E_n} e^2$$

$$E = E_{100} - \alpha \epsilon^2$$

Лінійний Ефект Штарка

Розглянемо вплив зовнішнього поля на атом водню в 1-ому збудженому стані. Цей стан є 4 виродженням.

Спектр рівнів енергії такої системи знаходиться з умови:

$$\begin{vmatrix} E_2 - E + V_{11} & V_{12} & V_{13} & V_{14} \\ V_{21} & E_2 - E + V_{22} & V_{23} & V_{24} \\ V_{31} & V_{32} & E_2 - E + V_{33} & V_{34} \\ V_{41} & V_{42} & V_{43} & E_2 - E + V_{44} \end{vmatrix} = 0$$

Порахувавши матричні елементи, маємо

$$\begin{vmatrix} E_2 - E & -3e\alpha\epsilon & 0 & 0 \\ -3e\alpha\epsilon & E_2 - E & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_2 - E & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_2 - E \end{vmatrix}$$

Звідси $E^{(1,2)} = E_2$; $E^{(3,4)} = E_2 \pm 3e\alpha\epsilon$.

Ангармонічний осцилятор.

Знайдемо квантові рівні ангармонічного осцилятора. Його потенц. Енергія

$U(x) = \frac{1}{2} \mu \omega_0^2 x^2 + \lambda x^3 + \dots$. Збурення $V(x) = \lambda x^3 + \dots$. Для незбуреної системи $\lambda=0$ $E_n^0 = \hbar \omega_0 (n + 1/2)$, $\psi_n^0(x)$ -

виродження нема. Матричні елементи $V_{mn} = \int \psi_m^0 V \psi_n^0 dx = \lambda \int \psi_m^0 x^3 \psi_n^0 dx = \lambda (x^3)_{mn}$ Енергія к-

ого рівня збудження: $E_k = E_k^0 + \lambda V_{kk} + \lambda^2 \sum_{n \neq k} \frac{|V_{nk}|^2}{E_k^0 - E_n^0} + O(\lambda^3)$ $E_k = E_k^0 + \lambda (x^3)_{kk} + \lambda^2 \sum_{n \neq k} \frac{|(x^3)_{nk}|^2}{E_k^0 - E_n^0}$ (*)

$$(x^3)_{kn} = \sum_l x_{kl} (x^2)_{ln} = \sum_l x_{kl} \sum_m x_{lm} x_{mn} = \sum_l \sum_m x_{kl} x_{lm} x_{mn} \quad x_{mn} = \int \psi_m^* x \psi_n dx \quad \psi_n(\xi) = \exp(-\xi^2/2) H_n(\xi)$$

$H_n(\xi) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi}} \exp\{\xi^2\} \frac{d^n \exp\{-\xi^2\}}{d\xi^n}$ - поліном Чебишева-Ерміта п-ого порядку.

$$x_{mm} = x_0 \int_{-\infty}^{\infty} \exp\{-\xi^2\} H_m(\xi) H_n(\xi) d\xi \quad x_0 = \sqrt{\hbar/\mu\omega_0} \quad x_{mm} = x_0 (\sqrt{n/2} \delta_{n-1,m} + \sqrt{(n+1)/2} \delta_{n+1,m})$$

$$(x^3)_{kn} = x_0^3 \{ \sqrt{k(k-1)(k-2)/8} \delta_{k-3,n} + \sqrt{9k^3/8} \delta_{k-1,n} + \sqrt{9(k+1)^3/8} \delta_{k+1,n} + \sqrt{k(k+1)(k+2)/8} \delta_{k+3,n} \}$$

$$(x^3)_{kk} = 0 \quad (x^3)_{kn} = (x^3)_{nk} \quad \text{Підставляємо все в (*)} \quad E_k = \hbar\omega_0(k+1/2) - \frac{\lambda^2}{\hbar\omega_0} \left(\frac{\hbar}{\mu\omega_0}\right)^3 \frac{15}{4} (k^2 + k) + \frac{11}{30}$$

$k=0,1,2,\dots$ Знайдемо умову застосування наближення: для великих k $V_{kn} \approx \lambda x_0^{3/2} k^{3/2}$

$$E_k^0 - E_n^0 \approx \hbar\omega_0 \quad \lambda x_0^{3/2} \frac{k^{3/2}}{\hbar\omega_0} \ll 1 \quad k \ll \left(\frac{\mu^3 \omega_0^5}{\lambda^2 \hbar}\right)^{1/3}$$

Врахування скінченного розміру ядра в атомі водню

Врахування скінченного розміру ядра еквівалентне накладанню збурення $V_{збур}$

$$V_{реал} = V_0 + V_{збур}; \quad V_0 = \frac{-Ze^2}{r}$$

$$V_{реал} = \int_{\infty}^R F(r) dr - \int_R^r F(r) dr = \frac{-Ze^2}{r} - \int_R^r eE(r) dr = \frac{-3Ze^2}{R} + \frac{Ze^2}{2R^3} r^2$$

$$V_{збур} = \begin{cases} \frac{Ze^2}{r} - \frac{3Ze^2}{R} + \frac{Ze^2}{2R^3} r^2; & r < R \\ 0; & r > R \end{cases}$$

46. Нестационарне збурення

Нестационарні збурення – збурення, залежні від часу.

Розглянемо еталонну систему, якій відповідає стаціонарний оператор Гамільтона $\hat{H}_0(q)$. У загальному випадку еволюція цієї системи описується нестационарним рівнянням Шредінгера $i\hbar \frac{\partial \varphi(q,t)}{\partial t} = \hat{H}_0(q) \varphi(q,t)$, а її стан відповідає хвильовій функції $\varphi(q,t) = \sum_n c_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \psi_n(q)$, у якій $\psi_n(q)$ є розв'язком стаціонарного рівняння Шредінгера.

Накладемо на систему нестационарне збурення

$$\hat{V}(q,t) = \begin{cases} \hat{V}(q,t), & t_0 \leq t \leq \tau; \\ 0, & t < t_0, \quad t > \tau. \end{cases}$$

Система описується нестационарним рівнянням Шредінгера

$$i\hbar \frac{\partial \psi(q, t)}{\partial t} = (\hat{H}_0(q) + \hat{V}(q, t)) \psi(q, t).$$

Розв'язок цього рівняння $\psi(q, t) = \sum_n c_n(t) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} \psi_n(q)$ будемо шукати методом варіації довільних сталих $c_n(t)$. Після підстановки отримуємо рівняння $i\hbar \sum_n \frac{\partial c_n(t)}{\partial t} e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} \psi_n(q) = \sum_n c_n(t) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} \hat{V}(q, t) \psi_n(q)$. Помноживши обидві частини на власну функцію $\psi_m^*(q)$, а потім проінтегрувавши, маємо:

$$i\hbar \frac{\partial c_m(t)}{\partial t} = \sum_n c_n(t) e^{i\omega_{mn}t} V_{mn}(t),$$

$$V_{mn}(t) = \int \psi_m^*(q) \hat{V}(q, t) \psi_n(q) dq, \quad \omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar}$$

Введемо параметр мализни енергії нестационарного збурення $V_{mn}(t) = \lambda \tilde{V}_{mn}(t)$, $|\lambda| \ll 1$. Розв'язок шукаємо у вигляді ряду

$$c_n(t) = c_n^{(0)}(t) + \lambda c_n^{(1)}(t) + \lambda^2 c_n^{(2)}(t) + \dots$$

Після підстановки отримуємо рівняння $i\hbar \left\{ \frac{\partial c_m^{(0)}(t)}{\partial t} + \lambda \frac{\partial c_m^{(1)}(t)}{\partial t} + \lambda^2 \frac{\partial c_m^{(2)}(t)}{\partial t} + \dots \right\} =$

$= \lambda \sum_n (c_n^{(0)}(t) + \lambda c_n^{(1)} + \lambda^2 c_n^{(2)} + \dots) e^{i\omega_{mn}t} \tilde{V}_{mn}(t)$. У нульовому наближенні за параметром λ знаходимо $i\hbar \frac{\partial c_m^{(0)}(t)}{\partial t} = 0$, $c_m^{(0)}(t) = \text{const}$. $c_m^{(0)}(t_0) = \delta_{ms}$. У першому

наближенні за параметром λ отримуємо рівняння: $i\hbar \frac{\partial c_m^{(1)}(t)}{\partial t} = e^{i\omega_{ms}t} \tilde{V}_{ms}(t)$, яке має розв'язок $c_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t \tilde{V}_{ms}(t') e^{i\omega_{ms}t'} dt'$. У другому наближенні маємо рівняння:

$$i\hbar \frac{\partial c_m^{(2)}(t)}{\partial t} = \sum_n c_n^{(1)} \tilde{V}_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t} = \sum_n \left\{ \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t \tilde{V}_{ns}(t') e^{i\omega_{ns}t'} dt' \right\} \tilde{V}_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t}$$

$$\text{і його розв'язок } c_m^{(2)}(t) = \sum_n \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t \left\{ \int_{t_0}^{t'} \tilde{V}_{ns}(t'') e^{i\omega_{ns}t''} dt'' \right\} \tilde{V}_{mn}(t') e^{i\omega_{mn}t'} dt'$$

Таким чином, остаточний розв'язок $c_m(t) =$

$$\delta_{ms} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t V_{ms}(t') e^{i\omega_{ms}t'} + \sum_n \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t \left\{ \int_{t_0}^{t'} V_{ns}(t'') e^{i\omega_{ns}t''} dt'' \right\} V_{mn}(t') e^{i\omega_{mn}t'} dt' + \dots$$

це хвильва функція збуреної системи в енергетичному представленні.

У координатному представленні хвильова функція має вигляд $\psi(q, t) = \left\{ 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t V_{ss}(t') dt' + \dots \right\} e^{-i \frac{E_s t}{\hbar}} \psi_s(q) + \sum_{n \neq s} \left\{ \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t V_{ms}(t') e^{i\omega_{ms}t'} dt' + \dots \right\} e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} \psi_n(q)$.

Видно, у квантовій системі під дією нестационарного збурення відбувається зміна нестационарних амплітуд $c_m(t)$ збудження квантових станів, що еквівалентно переходам системи під дією збурення між різними станами.

46. Точний розв'язок рівняння Шредінгера для дворівневої збуреної системи

Припустимо, що нам відомі всі розв'язки рівняння Шредінгера $\hat{H}_0(q)\psi_n(q) = E_n\psi_n(q)$. Вважатимемо, що всі власні функції $\psi_n(q)$ є невідродженими. Розкладемо невідому функцію $\psi(q)$ за $\psi_n(q)$: $\psi(q) = \sum_n c_n \psi_n(q)$

$$\sum_n c_n E_n \psi_n(q) + \sum_n \hat{V}(q) c_n \psi_n(q) = E \sum_n c_n \psi_n$$

Помноживши обидві частини на $\psi_m^*(q)$ і виконавши інтегрування по всій області, маємо $(E - E_m)c_m = \sum_n V_{mn} c_n$, де $V_{mn} = \int \psi_m^*(q) \hat{V}(q) dq$ - матричний елемент енергії збурення $\hat{V}(q)$. Виділивши малий параметр, маємо $(E - E_m)c_m = \lambda \sum_n \hat{V}_{mn} c_n$. Розв'язки цього рівняння шукатимемо у вигляді $E = E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} \dots$, $c_n = c_n^{(0)} + \lambda c_n^{(1)} + \lambda^2 c_n^{(2)} \dots$

Після підстановки маємо $(E^{(0)} - E_m + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} \dots) (c_m^{(0)} + \lambda c_m^{(1)} + \lambda^2 c_m^{(2)} \dots) = \lambda \sum_n \hat{V}_{mn} (c_n^{(0)} + \lambda c_n^{(1)} + \lambda^2 c_n^{(2)} \dots)$. У нульовому порядку за параметром λ маємо $(E^{(0)} - E_m)c_m^{(0)} = 0$

$$c_m^{(0)} = \delta_{mk}, E^{(0)} = E_k$$

У першому порядку $(E_k - E_m)c_m^{(1)} + E^{(1)}\delta_{mk} = \tilde{V}_{mk}$

У другому порядку $(E_k - E_m)c_m^{(2)} + \tilde{V}_{kk}c_m^{(1)} + E^{(2)}\delta_{mk} = \sum_n \tilde{V}_{mn}c_n^{(1)}$

Остаточний вираз для енергії збуреної системи

$$E = E_k + \lambda \tilde{V}_{kk} + \sum_{n \neq k} \frac{\lambda^2 |\tilde{V}_{nk}|^2}{(E_k - E_n)} + \dots = E_k + V_{kk} + \sum_{n \neq k} \frac{|V_{nk}|^2}{(E_k - E_n)} + \dots$$

З отриманих розв'язків, необхідна умова збіжності ітераційного ряду $\left| \frac{V_{mk}}{(E_k - E_m)} \right| \ll 1$, $m \neq k$; $V_{kk} \ll E_k$. Звідси випливає, що розглянутий варіант теорії збурень не можна використовувати в системах, де спектр рівнів стає дуже щільним (при $E_k - E_m \rightarrow 0$). У координатному представленні хвильова функція збуреної системи має вигляд $\psi(q) = \sum_n c_n \psi_n(q) = \psi_k(q) + \sum_{n \neq k} \frac{V_{nk}}{(E_k - E_n)} \psi_n(q) + \dots$

48. Частота та прецесія Рабі.

Частота Рабі вводиться при розв'язку задачі про визначення n -ого та m -ого розв'язків рівняння Шредінгера, при наявності періодичного збурення. Її фізичний зміст – це періодична змін ймовірності знаходження системи в будь-який момент в деякому

стані. Нехай у нас є періодичне збурення типу $\hat{V} = \hat{F} e^{-i\omega t} + \hat{G} e^{i\omega t}$ (1). \hat{F} та \hat{G} оператори незалежні від часу. В силу ермітовості \hat{V} повинно бути $\hat{F} e^{-i\omega t} + \hat{G} e^{i\omega t} = \hat{F}^+ e^{-i\omega t} + \hat{G}^+ e^{i\omega t}$, тобто $\hat{G} = \hat{F}^+$ або $G_{nm} = F_{mn}^*$. Тоді $V_{kn}(t) = V_{kn} e^{i\omega_{kn}t} = F_{kn} e^{i(\omega_{kn} - \omega)t} + F_{kn}^* e^{i(\omega_{kn} + \omega)t}$. $E_m^{(0)} - E_n^{(0)} = \hbar(\omega + \varepsilon)$, ε -мала величина. З рівняння Шредінгера, для збурення залежного від часу (див. нестационарне збурення), можна отримати $i\hbar \frac{da_m}{dt} = \sum_k V_{mk}(t) a_k$ (3).

Найбільш суттєвий ефект виникає від тих членів в сумах в правій частині (3), в яких залежність від часу визначається малою $\omega_{mn} - \omega$. Нехтуючи всіма іншими членами

отримуємо систему з двох рівнянь: $i\hbar \frac{da_m}{dt} = F_{mn} e^{i(\omega_{mn} - \omega)t} a_n = F_{mn} e^{i\varepsilon t} a_n$ и $i\hbar \frac{da_n}{dt} = F_{mn}^* e^{-i\varepsilon t} a_m$.

Робимо підстановку $a_n e^{i\varepsilon t} = b_n$. $i\hbar \dot{a}_m = F_{mn} b_n$ и $i\hbar (\dot{b}_n - i\varepsilon b_n) = F_{mn}^* a_m$. Виключаємо a_m :

$\ddot{b}_n - i\varepsilon \dot{b}_n + \frac{1}{\hbar^2} |F_{mn}|^2 b_n = 0$. Введемо заміни (як в курсі колегла) $\nu = \frac{F_{mn}}{\hbar}$ - частота Рабі. В

якості 2 незалежних розв'язків обираємо: $a_n = A e^{i\alpha_1 t}$, $a_m = -A \frac{\hbar \alpha_1}{F_{mn}^*} e^{i\alpha_2 t}$ (4) и $a_n = B e^{-i\alpha_2 t}$,

$a_m = B \frac{\hbar \alpha_2}{F_{mn}^*} e^{-i\alpha_1 t}$ (5) (A та B знаходяться з умови нормування). $\alpha_1 = -\frac{\varepsilon}{2} + \Omega$, $\alpha_2 = \frac{\varepsilon}{2} + \Omega$,

$\Omega = \sqrt{\frac{\varepsilon^2}{4} + |\nu|^2}$ -прецесія Рабі. Таким чином, під впливом збурення f $\Psi_n^{(0)}, \Psi_m^{(0)}$ перейдуть в

$a_n \Psi_n^{(0)} + a_m \Psi_m^{(0)}$ з a_n, a_m із (4) чи (5). Нехай в кожен момент часу ($t=0$) система

знаходилась в стані. $\Psi_m^{(0)}$ Стан системи в наступні моменти часу визначається лінійною комбінацією 2 отриманих нами, перетворюване при $t=0$ в $\Psi_m^{(0)}$:

$\Psi = (e^{i\varepsilon/2} \cos \Omega t - \frac{i\varepsilon}{2\Omega} e^{-i\varepsilon/2} \sin \Omega t) \Psi_m^{(0)} - (\frac{i\nu^*}{\Omega} e^{-i\varepsilon/2} \sin \Omega t) \Psi_n^{(0)}$. Квадрат модуля коефіцієнту

при $\Psi_n^{(0)} = \frac{|\nu|^2}{2\Omega^2} (1 - \cos 2\Omega t)$ (6). Він визначає залежність знаходження системи в момент

часу t в стані $\Psi_n^{(0)}$. Це періодична, з частотою 2Ω , яка змінюється в межах від 0 до

$|\nu|^2 / \Omega^2$. При $\varepsilon=0$ (точний резонанс) ймовірність (6) буде $\frac{1}{2} (1 - \cos 2|\nu|t)$. Вна періодично

змінюється між 0 та 1; або частота системи зі стану $\Psi_m^{(0)}$ в стан $\Psi_n^{(0)}$.

49. Ймовірність переходу під дією малого збурення.

Випадок гармонійного збурення.

$$V(r, t) = U(r) \cos \omega t \quad 0 \leq t \leq T \quad W_{sk} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^T U_{sk} \frac{1}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) e^{-i\omega_{sk} t} dt \right|^2 =$$

$$\frac{1}{4\hbar^2} |U_{sk}|^2 \left| \frac{e^{-i(\omega_{sk} - \omega)t} - 1}{-i(\omega_{sk} - \omega)} + \frac{e^{-i(\omega_{sk} + \omega)t} - 1}{-i(\omega_{sk} + \omega)} \right|^2 \approx (2 \text{ резонанси } \omega_{sk} = \pm \omega) \frac{1}{4\hbar^2} |U_{sk}|^2 \sum_{\pm} \left| \frac{e^{-i(\omega_{sk} \pm \omega)t} - 1}{-i(\omega_{sk} \pm \omega)} \right|^2 =$$

$$\frac{1}{4\hbar^2} |U_{sk}|^2 \sum_{\pm} \frac{4 \sin^2 \left(\frac{1}{2} (\omega_{sk} \pm \omega) t \right)}{(\omega_{sk} \pm \omega)^2} = \frac{1}{4\hbar^2} |U_{sk}|^2 \sum_{\pm} \left| \frac{\sin \left(\frac{1}{2} (\omega_{sk} \pm \omega) t \right)}{\frac{1}{2} (\omega_{sk} \pm \omega)} \right|^2 \quad (\text{так як } |e^{-ix} - 1|^2 = |e^{-ix} - 1| |e^{-ix} - 1| = 2(1 - \cos x) = 4 \sin^2 \frac{x}{2})$$

$$F(\omega_{sk} \pm \omega, t) = \left| \frac{\sin \left(\frac{1}{2} (\omega_{sk} \pm \omega) t \right)}{\frac{1}{2} (\omega_{sk} \pm \omega)} \right|, \text{ при } t \rightarrow \infty \text{ матимемо } \delta \text{ f Хай } F(\omega_{sk} \pm \omega, t) = \pi \delta \left(\frac{\omega_{sk} \pm \omega}{2} \right) = 2\pi \delta(\omega_{sk} \pm \omega)$$

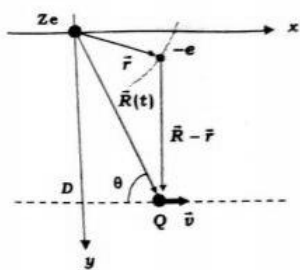
$$t \rangle \left| \frac{2}{\omega_{sk} \pm \omega} \right| \quad \text{Тоді } W_{sk} = \frac{1}{2\hbar^2} |U_{sk}|^2 \pi \delta(\omega_{sk} \pm \omega) \approx t \quad \text{ймовірність переходу за 1 часу}$$

$$P_{sk} = \frac{W_{sk}}{t} = \frac{1}{2\hbar^2} |U_{sk}|^2 \pi \delta(\omega_{sk} \pm \omega) \cdot \omega_{sk} \pm \omega = 0 \quad \frac{1}{\hbar} (E_s - E_k) \pm \omega = 0 \quad E_k = E_s \pm \hbar \omega \quad \text{ймовірність}$$

переходу вниз і вгору однакова. Коли $\omega \rightarrow 0$ збурення неперіодичне. $V(r, t) = U(r)$ переходи будуть можливі в межах 1 рівня. При Кусково-постійному збуренні можливі, бо можуть бути резонансні гармоніки Фурє-спектру.

50. Збудження атома та міжрівневі переходи в атомах під дією кулонівського поля важкого йона, що рухається. Випадки адіабатичної та імпульсної взаємодії.

Метод псевдофотонів Вайцеккера.



Частинка з зарядом Q рухається вздовж осі x на прицільній відстані D від ядра з постійною швидкістю \vec{v} , з атомним електроном. (рис.) поточна координата частинки і електрона в с.к. пов'язаній з ядром: $\vec{R}(t) = \{vt, D, 0\}$; $\vec{r} = \{x, y, z\}$.

Енергія взаємодії частинки з атомом: (1)

$$V(\vec{R}(t), r) = -\frac{Qe}{|\vec{R}(t) - \vec{r}|} + \frac{ZeQ}{|\vec{R}(t)|} = -\frac{Qe}{\sqrt{(vt-x)^2 + (D-y)^2 + z^2}} + \frac{ZeQ}{\sqrt{(vt)^2 + D^2}}$$

Залежність від час є

причиною квантових переходів між різними станами електрона в атомі.

Повна імовірність переходу за весь час прольоту частинки біля конкретного атома:

$$W_{nm}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} V_{nm}(t) e^{i\omega_{nm}t} dt \right|^2, \quad (2)$$

$V_{nm}(t)$ – матричний елемент оператора енергії взаємодії (1)

Вважатимемо, що частинка пролітає за межами атома: $\frac{|r|}{\sqrt{D^2 + v^2 t^2}} \ll 1$, тоді розкладемо

$V(\vec{R}(t), r)$ обмежившись першим порядком

$$\hat{V}(\vec{R}(t), r) \approx -\frac{Qe}{\sqrt{D^2 + v^2 t^2}} \left(1 + \frac{vtx + Dy}{D^2 + v^2 t^2} \right) + \frac{ZeQ}{\sqrt{(vt)^2 + D^2}} \quad (3)$$

Дві компоненти енергії взаємодії, які містить вираз (3) відповідають двом складовим вектора напруженості електричного поля частинки. Одна величина якої визначається координатою x , напрямлена паралельно вектору \vec{v} , а інша, пропорційна координаті y , перпендикулярна до $[\vec{e}_z \times \vec{v}]$. Матричні елементи цього оператора:

$$V_{nm}(t) = \int \Psi_n^*(\vec{r}) \hat{V}(\vec{R}(t), \vec{r}) \Psi_m(\vec{r}) dV = -\frac{Qe}{\sqrt{D^2 + v^2 t^2}} \left\{ \delta_{nm} + \frac{vtx_{nm} + Dy_{nm}}{D^2 + v^2 t^2} \right\} + \frac{ZeQ}{\sqrt{D^2 + v^2 t^2}} \delta_{nm}$$

x_{nm} y_{nm} – матричні елементи відповідних компонент координати електрона в ямі.

Вирази, що містять символ Кронекера, відмінні від нуля тільки тоді, коли $n=m$ (атом залишається у тому ж стані після взаємодії з рухомою частинкою). При переході між різними рівнями:

$$V_{nm}(t) = -\frac{Qe}{D^3} \frac{vtx_{nm} + Dy_{nm}}{\left(1 + (t/T)^2\right)^{3/2}}, \quad T = \frac{D}{v} \quad T - \text{тривалість перебування рухомої частинки біля атома.}$$

Ймовірності переходу:

$$W_{nm}(t) = \frac{(Qe)^2}{\hbar^2 D^6} |vx_{nm} J_1 + Dy_{nm} J_2|^2$$

$$J_1 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{te^{i w_{nm} t}}{\left(1 + (t/T)^2\right)^{3/2}} dt = T^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{te^{i(w_{nm} T)\tau}}{(1 + \tau^2)^{3/2}} d\tau, \quad \tau = t/T$$

$$J_2 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i w_{nm} t}}{\left(1 + (t/T)^2\right)^{3/2}} dt = T \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i(w_{nm} T)\tau}}{(1 + \tau^2)^{3/2}} d\tau$$

Якщо $T \gg 1/w_{nm}$, то підінтегральні вирази в J_1 і J_2 являють собою швидкоосцилюючі знакозмінні функції, період осциляцій яких значно менший ніж характеристична тривалість T великої амплітуди модулюючого множника, що стоїть перед експонентою і відображає залежність від часу енергії взаємодії частинки з електроном. У цьому випадку $J_{1,2} \approx 0$. Такий режим взаємодії називають адіабатичною взаємодією, він існує при $D \gg v/w_{nm}$. Це відбуватиметься, якщо частинка рухатиметься на великій відстані від атома або матиме малу швидкість. Граничний випадок $D \ll v/w_{nm}$ відповідає умові імпульсної взаємодії і справедливий під час руху частинки з великою швидкістю або на малій відстані від атома. У цьому випадку:

$$J_1 \approx T \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\tau}{(1 + \tau^2)^{3/2}} d\tau = 0,$$

$$J_2 = T \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(1 + \tau^2)^{3/2}} d\tau = 2T$$

$$W_{nm}(t) \approx \frac{4(Qe)^2 |y_{nm}|^2}{\hbar^2 v^2 D^2}, D \gg v/w_{nm}$$

$$0, D \ll v/w_{nm}$$

51. Взаємодія атома з електромагнітним полем довільної довжини хвилі.

Застосуємо теорію переходів у квантовій системі, викликаних нестационарним збуренням до задачі про переходи, стимульовані електромагнітним випромінюванням $\vec{A}(\vec{r}, t) = A_0 \vec{e}_k \cos(\omega t - \vec{k}\vec{r})$ (1) – вектор-потенціал, що описує електромагнітне поле у вакуумі. Де A_0 - амплітуда вектор-потенціалу, \vec{e}_k - одиничний вектор поляризації.

Поле (1) є поперечним і: $\Delta \vec{A}(\vec{r}, t) \sim (\vec{k}\vec{e}_k) = 0$

$\vec{A}(\vec{r}, t)$ - визначає електричного і магнітного полів.

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}(\vec{r}, t)}{\partial t} = \vec{E}_0 \sin(\omega t - \vec{k}\vec{r}), \quad \vec{E}_0 = \vec{e}_k A_0 \frac{\omega}{c},$$

$$\vec{H}(\vec{r}, t) = \Delta \times \vec{A}(\vec{r}, t) = \vec{H}_0 \sin(\omega t - \vec{k}\vec{r}), \quad \vec{H}_0 = [\vec{e}_k \times \vec{k}],$$

\vec{E}_0 - амплітуда напруженості електричного поля, \vec{H}_0 - магнітного. A_0 знайдемо через енергетичну інтенсивність електромагнітної хвилі, яку слід розуміти як абсолютну величину усередненого за період коливань вектора Умова-Пойнтінга:

$$J_0 = \left\langle [\vec{E}(\vec{r}, t) \times \vec{H}(\vec{r}, t)] \right\rangle_T = \frac{A_0^2 \omega^2}{8\pi c}, \quad A_0 = \frac{\sqrt{8\pi c J_0}}{\omega}.$$

Потокова інтенсивність $J_0 = \hbar \omega I_0$, визначає кількість квантів даної частоти ω , що пройшли за одиницю часу через одиничний переріз.

$$\text{Оператор Гамільтона: } \hat{H} = \sum_{\beta} \frac{\left(\hat{p}_{\beta} + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}_{\beta}, t) \right)^2}{2\mu} + U = \sum_{\beta} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\beta} + V_1(\vec{r}_{\beta}, t) + V_2(\vec{r}_{\beta}, t) \right\} + U$$

$$\hat{V}_1(\vec{r}_{\beta}, t) = \frac{e}{\mu c} \vec{A}(\vec{r}_{\beta}, t) \hat{p}_n, \quad \hat{V}_2(\vec{r}_{\beta}, t) = \frac{e^2 A^2(\vec{r}_{\beta}, t) \hat{p}_n}{2\mu c^2}$$

За граничної амплітуди $\hat{V}_1(\vec{r}_{\beta}, t) = \hat{V}_2(\vec{r}_{\beta}, t)$ і з умови квантування Бора: $p = \mu c^2 / \hbar$:

$$J_{0(ep)} \approx \frac{\mu^2 \omega^2 e^2 c}{2\pi \hbar}$$

Обмежимося аналізом взаємодії з квантовими системами більш слабких електромагнітних хвиль з $J_0 < J_{0(ep)}$, залишаючи в \hat{H} :

$$\hat{V}_1(\vec{r}_{\beta}, t) \equiv \hat{V}(\vec{r}_{\beta}, t) = \frac{e A_0}{2\mu c} \left\{ e^{i(\omega t - \vec{k}\vec{r}_{\beta})} + e^{-i(\omega t - \vec{k}\vec{r}_{\beta})} \right\} (\vec{e}_k \hat{p}_{\beta}) - \text{відповідає енергії нестационарного}$$

збурення.

Імовірність переходу одного електрона з n-го на m-ий рівень під дією електромагнітного поля, яке вмикається в момент часу $t=0$:

$$W_{nm} = \left| \frac{1}{\hbar} \int_0^t V_{nm}(t') e^{i w_{nm} t'} dt' \right|^2 = \frac{e^2 A_0^2}{4 \hbar^2 \mu^2 c^2} \left| \int_0^t e^{i(w_{nm} + w)t'} dt \int \Psi_n^* e^{-i \vec{k} \vec{r}} (\vec{e}_k \hat{p}) \Psi_m dv + \int_0^t e^{i(w_{nm} - w)t'} dt \int \Psi_n^* e^{i \vec{k} \vec{r}} (\vec{e}_k \hat{p}) \Psi_m dv \right|^2$$

тоді повна імовірність:

$$W_{nm}(t) = \frac{\pi e^2 A_0^2 t}{2 \hbar^2 \mu^2 c} |B_{nm}|^2 \delta(w_{nm} \pm w) = \frac{4 \pi^2 e^2 J_0 t}{\hbar^2 \mu^2 w^2 c} |B_{nm}|^2 \delta(w_{nm} \pm w)$$

Імовірність переходу на одиницю часу:

$$P_{nm} = \frac{4 e^2 J_0 \pi^2}{\hbar^2 \mu^2 w^2 c} |B_{nm}|^2 \delta(w_{nm} \pm w)$$

$$B_{nm} = \int \Psi_n^*(\vec{r}) e^{\mp i \vec{k} \vec{r}} (\vec{e}_k \hat{p}) \Psi_m(\vec{r}) dv$$

54. Квадрупольне та мультипольне в теорії випромінювання. Правила відбору

Сила осцилятора.

Коефіцієнт поглинання електромагнітного випромінювання.

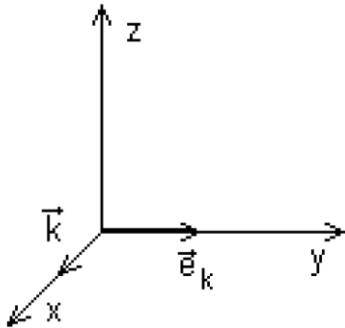
Ефективний переріз поглинання.

Ймовірність переходу за 1-цю часу:

$$P_{\alpha\beta} = \frac{4 e^2 J_0 \pi^2}{\hbar \mu^2 \omega^2 c} \delta(E_\alpha - E_\beta \pm \hbar \omega) |B_{\alpha\beta}|^2 \quad (1), \quad \text{де}$$

$B_{\alpha\beta} = \int \psi_\alpha^*(\vec{r}) e^{\mp i \vec{k} \vec{r}} (\vec{e}_k \hat{p}) \psi_\beta(\vec{r}) dv$ (2) матричний елемент. Використаємо уточнення наближеного розгляду $e^{\pm i \vec{k} \vec{r}} \approx 1 \pm i \vec{k} \vec{r}$. Виберемо конкретну орієнтацію векторів $\vec{k} \parallel \vec{e}_x$ та $\vec{e}_k \parallel \vec{e}_y$. Введемо формальну заміну у матричний елемент $x \hat{p}_y = \frac{1}{2} (x \hat{p}_y + y \hat{p}_x) + \frac{1}{2} (x \hat{p}_y - y \hat{p}_x)$, який запишеться у наступному вигляді:

$$B_{\alpha\beta}^{(z)} = \mp i \frac{k}{2} \int \psi_\alpha^*(\vec{r}) (x \hat{p}_y + y \hat{p}_x) \psi_\beta(\vec{r}) dv \mp i \frac{k}{2} \int \psi_\alpha^*(\vec{r}) (x \hat{p}_y - y \hat{p}_x) \psi_\beta(\vec{r}) dv \quad (3)$$



Приведемо операторні вирази в обох доданках до вигляду:

$$x \hat{p}_y + y \hat{p}_x = \mu \frac{1}{i \hbar} [xy, \hat{H}],$$

$$x \hat{p}_y - y \hat{p}_x = \hat{L}_z = -\frac{2 \mu c}{e} \hat{M}_z$$

Враховуючи умову самоспряженості оператора Гамільтона, перетворимо інтеграл у формулі (3)

$$\int \psi_\alpha^*(\vec{r}) (x \hat{p}_y + y \hat{p}_x) \psi_\beta(\vec{r}) dv = \frac{\mu}{i \hbar} \{ E_\beta \int \psi_\alpha^*(\vec{r}) xy \psi_\beta(\vec{r}) dv - E_\alpha \int xy \psi_\beta(\vec{r}) \psi_\alpha^*(\vec{r}) dv \} \quad (4)$$

Підставивши результат до формули (3), отримаємо структурований вираз для матричного елемента: $B_{nlm,n'l'm'}^{(z)} = \pm \frac{k\mu\omega_{nm}}{e} \left((Q_{xy})_{nlm,n'l'm'} + i \frac{c}{\omega_{nm}} (\hat{M}_z)_{nlm,n'l'm'} \right)$ (5), де

$Q_{xy} = \frac{e}{2} xy$ – один із елементів матриці квадрупольного електричного моменту атома.

$$\hat{Q} = \frac{e}{2} \begin{pmatrix} xx & xy & xz \\ yx & yy & yz \\ zx & zy & zz \end{pmatrix}, \text{ а } \hat{M}_z - \text{проекція орбітального магнітного моменту атома на}$$

вісь oz . Остаточний вираз для ймовірності радіаційного переходу, забороненого в дипольному наближенні, має вигляд

$$P_{nlm,n'l'm'}^{(z)} = J_0 \frac{\pi^2 \omega_{nm}^2 \mu^2}{\hbar c^3} \delta(E_\alpha - E_\beta \pm \hbar\omega) \left| (Q_{xy})_{nlm,n'l'm'} + i \frac{c}{\omega_{nm}} (\hat{M}_z)_{nlm,n'l'm'} \right|^2$$

(6)

При циклічній зміні орієнтації векторів вирази для матричного елемента та ймовірності переходу знаходимо простою циклічною заміною відповідних координат. Переходи, пов'язані з матричними елементами $(\hat{Q}_{x_i x_j})_{nlm,n'l'm'}$ електричного квадрупольного моменту атома називають *квадрупольними переходами* (скорочене позначення E2). Визначимо правила відбору для цих переходів, використовуючи правила множення матриць $(\hat{A}\hat{B})_{\alpha\beta} = \sum_\gamma \hat{A}_{\alpha\gamma} \hat{B}_{\gamma\beta}$.

Враховуючи, що матричні елементи $x_{ll''}, y_{ll''}, z_{ll''}$ та $y_{l'l''}, z_{l'l''}, x_{l'l''}$ відмінні від 0 за умов $l = l'' \pm 1, l'' = l' \pm 1$, знаходимо зв'язок між початковим і кінцевим орбітальними квантовими числами при електричних квадрупольних переходах $l' = l, l \pm 2$

Аналогічно знаходимо правила відбору для магнітного квантового числа для електричних квадрупольних переходів E2 різної орієнтації:

$$(xy)_{mm'}: m' = m, m \pm 2,$$

$$(yz)_{mm'}: m' = m \pm 1,$$

$$(zx)_{mm'}: m' = m \pm 1,$$

$$(\hat{Q})_{mm'}: m' = m, m \pm 1, m \pm 2.$$

Процедуру впливу розкладу фазової експоненти $e^{\pm i\vec{k}\vec{r}} \approx 1 \pm \vec{k}\vec{r} - \frac{(\vec{k}\vec{r})^2}{2} + \dots$ на ймовірність вимушеного переходу можна продовжувати. Кожний наступний член розкладу приводить до зміни правил відбору й відповідає певній мультиплетності електричних (типу EL) переходів. При цьому відносна ймовірність радіаційних

переходів типу E_L, пов'язаних з урахуванням L-го члена розкладу, у $\approx (k|r_{nlm,n'l'm'}|)^{-2(L-1)}$ разів менша, ніж ймовірність дозволеного переходу типу E1. Необхідно зауважити, що переходи з мультипольністю, вищою за E2, зустрічаються й мають істотне значення тільки в ядерній фізиці.

Для переходів з рівня E_m на E_n вводять коефіцієнти Ейнштейна для спонтанного випромінювання та поглинання

$$B_n^m = \frac{1}{8\pi f_m} \sum_n \int b_{n\alpha}^m d\Omega, \text{ де } f_m - \text{ступінь виродження рівня } E_m$$

55. Квантова теорія дисперсії.

Задача про дисперсію світла в квантовій теорії може бути поставлена в повну паралель з квантовою теорією випромінювання та поглинання світла. Подібно до того, як в цих випадках розглядається ймовірність поглинання або випромінювання кванта світла, так і у випадку дисперсії можна шукати ймовірність того, що початковий квант світла (падаючий пучок) змінить в результаті взаємодії з атомом напрямок свого імпульсу, а в загальному випадку і свою енергію.

Нехай атом до включення світлового поля знаходився на одному зі своїх квантових рівнів E_n , власна функція, що відповідає цьому стану, нехай буде $\psi_n^0(r, t)$. При наявності світлового поля стан атома буде іншим (в ньому будуть виникати вимушені коливання). Нехай це стан описується функцією $\psi_n(r, t)$.

$$\text{Нехай } \psi_n(r, t) = \psi_n^0(r)e^{-i\omega_n t} + u_n(r)e^{-i(\omega_n - \omega)t} + v_n(r)e^{-i(\omega_n + \omega)t} \quad (1),$$

де $\omega_n = \frac{E_n}{\hbar}$, а u_n і v_n – поправки до ψ_n^0 .

Розкладемо u_n і v_n в ряди по ортогональних функціях ψ_n^0 :

$$u_n = \sum_i A_{ni} \psi_i^0 \quad v_n = \sum_i B_{ni} \psi_i^0$$

Помноживши ці вирази на ψ_k^{0*} і проінтегрувавши на всьому проміжку можемо знайти A_{nk}, B_{nk} :

$$A_{nk} = -\frac{\xi_0 D_{kn}}{2\hbar(\omega_{nk} - \omega)} \quad B_{nk} = -\frac{\xi_0 D_{kn}}{2\hbar(\omega_{nk} + \omega)} \quad (2), \text{ де}$$

$\omega_{nk} = \omega_n - \omega_k = \frac{E_n - E_k}{\hbar}$ – власні частоти атома, а D_{kn} – матричний елемент вектора електричного моменту.

Підставимо A_{nk} і B_{nk} у u_n і v_n , одержимо наближене значення для $\psi_n(r, t) = \psi_n^0(r)e^{-i\omega_n t} - \frac{e^{-i(\omega_n - \omega)t}}{2\hbar} \sum_k \frac{\xi_0 D_{kn}}{2\hbar(\omega_{nk} - \omega)} \psi_k^0(r) - \frac{e^{-i(\omega_n + \omega)t}}{2\hbar} \sum_k \frac{\xi_0 D_{kn}}{2\hbar(\omega_{nk} + \omega)} \psi_k^0(r) \quad (3)$

Обчислимо тепер в першому наближенні електричний момент $p_{nn}(t)$, що індукується полем $\xi(t)$ в стані ψ_n^0

$$p_{nn} = -e \int |\psi_n(r, t)|^2 dv \quad (4)$$

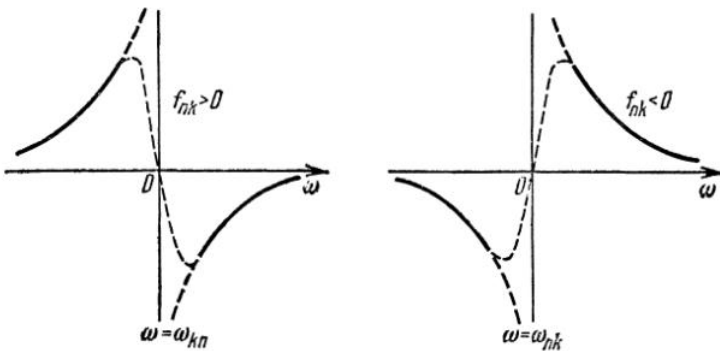
Підставимо $|\psi_n(r, t)|^2$ у явному вигляді, одержимо

$$p_{nn}(t) = D_{nn} - \frac{e^{i\omega_n t}}{2\hbar} \sum_k \left(\frac{(\xi_0 D_{kn}) D_{kn}^*}{(\omega_{nk} - \omega)} + \frac{(\xi_0 D_{kn}^*) D_{kn}}{(\omega_{nk} + \omega)} \right) - \frac{e^{-i\omega_n t}}{2\hbar} \sum_k \left(\frac{(\xi_0 D_{kn}) D_{kn}^*}{(\omega_{nk} + \omega)} + \frac{(\xi_0 D_{kn}^*) D_{kn}}{(\omega_{nk} - \omega)} \right)$$

Ми бачимо, що електричний момент p_{nn} складається з двох частин: з незалежного від часу моменту D_{nn} і з індукованого додаткового моменту, щолінійно залежить від поля. Індукований момент змінюється періодично в часі, і притому з частотою, рівною частоті падаючого світла ω . Більш того, фаза коливань цього моменту перебуває в певному зв'язку з фазою електричного вектора падаючого світла. Цей додатковий момент і відповідальний за когерентне розсіювання – дисперсію, позначимо його

$$p'_{nn} = p_{nn} - D_{nn}.$$

Звідси можемо знайти поляризацію:



$$\beta = \frac{e^2}{\mu} \sum_k \frac{f_{nk}}{\omega_{nk}^2 - \omega^2}, \quad \text{де } f_{nk} = \frac{2\mu |x_{nk}|^2 \omega_{nk}}{\hbar} = \frac{2\mu |D_{nk}|^2 \omega_{nk}}{e^2 \hbar} - \text{сила осцилятора, яка пов'язана з ймовірністю спонтанного переходу } A_{nk}^k.$$

$$f_{nk} = \frac{3\mu c^3}{2e^2 \omega_{kn}^2} A_{nk}^k. \quad \text{Таким чином, сила осцилятора визначає інтенсивність спонтанного випромінювання.}$$

Дисперсійні криві для додатної і від'ємної сили осцилятора

Для переходів з рівня E_m на E_n вводять коефіцієнти Ейнштейна для спонтанного випромінювання та поглинання

$$B_n^m = \frac{1}{8\pi f_m} \sum_n \int b_{n\alpha}^m d\Omega, \quad \text{де } f_m - \text{ступінь виродження рівня } E_m$$

56. Атомні та молекулярні спектри.

Ефект Месбауера.

З курсу атомної фізики нам відомо, що спектри атомів мають надтонку структуру. Спершу було виявлено дискретність енергетичних рівнів, пов'язана з головним квантовим числом n (квантування Бора-Зоммерфельда – на енергетичному рівні може знаходитися електрон (він же хвиля певної довжини та енергії), довжина хвилі якого уміщується цілу кількість разів на орбіталі). Згодом було виявлено наявність спіну в електрона – почали розглядати надтонку структуру спектрів атомів (ввели квантові числа l та s), яка пов'язана із спин-орбітальною взаємодією. Пізніше також було виявлено наявність власного спіну в ядер атомів (характеризується квантовим числом I), що призвело до розгляду надтонкої структури спектрів атомів. У спектрах атомів виділяють певні серії: головна, різка, дифузна, фундаментальна. Кожна із спектральних ліній відповідає переходам між певними енергетичними рівнями. Кожну із ліній можна отримати за допомогою комбінаційного принципу Рідберга-Рітца.

Детальніше зупинимось на спектрах молекул. Вони значно складніші атомних. Залежать від атомного складу, характеру хімічних зв'язків, структури, взаємодії з зовнішніми полями. Близькі за частотами лінії молекулярного спектру утворюють характерні групи ліній, які при спостереженні за допомогою спектрографів з середньою роздільною здатністю мають вигляд смуг. Складність обумовлена більш складним рухом молекул по відношенню до атомів. У них крім руху електронів, подібно до руху в атомів, необхідно також враховувати коливання та обертання. Енергія електронів у молекулах є сумою трьох складових енергій:

коливальної (вібрональної) E_v , обертальної E_r , електронної E_e з ієрархією $E_r < E_v < E_e$.

Між енергетичними рівнями можуть мати місце електронні переходи, дозволені правилами відбору. Внаслідок переходів з'являються спектральні лінії обертальних,

коливально-обертальних та більш складних електронно-коливально-обертальних спектрів.

Обертальні спектри:

$$E_r = \frac{\hbar^2 j(j+1)}{2J} = \frac{L_r^2}{2J}$$

Дозволені переходи:

$$\Delta j = \mp 1$$

Знаходяться в діапазоні

$$\lambda \sim 0.03 \dots 30 \text{ см}^{-1}$$

($10^8 \dots 3 \times 10^{11}$ Гц).

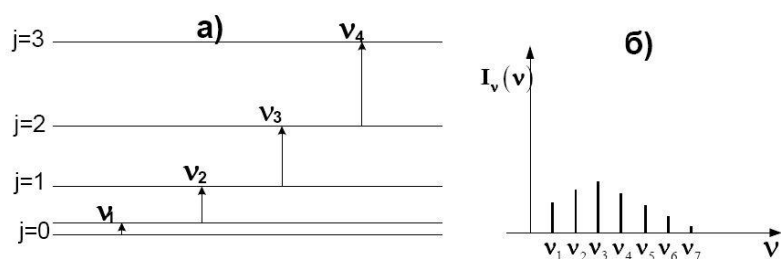


Рис.19.2. Схема обертальних термів (а) і розподіл інтенсивностей ліній (б).

Коливальні спектри: При більших енергіях збудження більших за 10-2 eВ стає суттєвим коливальний рух молекул. Потенціальна енергія молекули залежить від r - відстані між атомами ($V(r)$), що входять до її складу. Ця залежність повинна мати мінімум, тому що сили притягіння й відштовхування атомів по різному залежать від відстані між ними r . Вона схематично зображена на рисунку. Власна енергія молекули поблизу точки з координатою $r=r_0$ повинна мати вигляд, такий як у гармонічного осцилятора

$$E_v = (v + \frac{1}{2})\hbar\omega_v$$

Правила відбору: $\Delta v = \mp 1$.

У випадку малих збуджень (в наближенні гармонічного осцилятора) коливальний спектр складається з однієї лінії із частотою $\omega = \omega_v$. Ця лінія знаходиться у інфрачервоному (ІЧ) спектральному діапазоні ($\omega_v = 1$ - 25 мкм). При більших рівнях збудження (більших r) (рис.19.9) крива (II) потенціальної енергії $V(r)$ починає все більше і більше відрізнятися від параболи (I), притаманній гармонічному осцилятору. Виникають відмінності в поведінці молекул від поведінки гармонічного осцилятора. Ця особливість отримала назву ангармонізму.

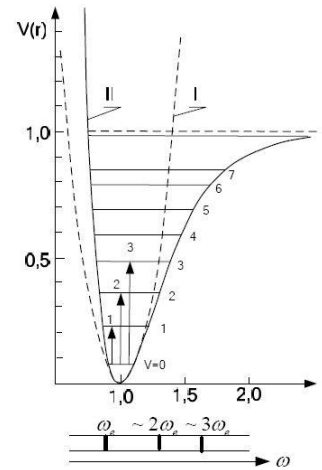
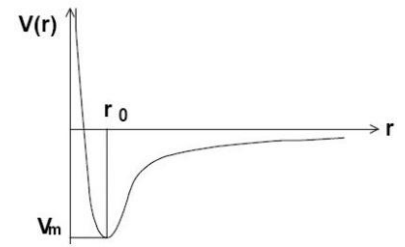


Рис.19.9. Потенціальна енергія коливального руху ідеального осцилятора (I), реального осцилятора (II) й 3 коливальних лінії.

Коливально-обертальні спектри молекул: Енергія коливального руху молекул

більша за енергію їхнього обертання, тому одночасно з коливанням збуджуються й обертальні стани молекул. Переходи між цими станами призводять до появи коливально-обертальних спектрів молекул. Розглянемо спочатку випадок малих збуджень, коли ангармонізмом і відцентровим спотворенням форми молекул можна знехтувати. У цьому випадку коливання й обертання молекул відбуваються незалежно одне від одного, і їхня

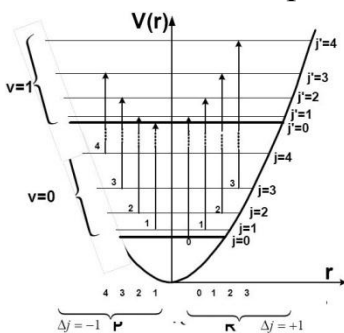


Рис.19.11. Р- і R- гілки коливально-обертального спектра двоатомної молекули.

енергія є адитивною сумою коливальної та обертальної енергій

$$E_{v,j} = E_v + E_j = B j(j+1) + (v + \frac{1}{2})\hbar\omega_v$$

Правила відбору ті ж : $\Delta v = \mp 1$, $\Delta j = \mp 1$.

При збільшенні рівня збудження спостерігаються відхилення від лінійних залежностей частот від квантових чисел для Р- і R- гілок. Вони викликаються двома обставинами: відцентровою зміною моменту інерції молекул і ангармонізмом.

Ефект Мессбауера — фізичне явище резонансного поглинання гамма-випромінювання атомів у твердому тілі. Ядро ізольованого атома не поглинає гамма-кванти тієї ж енергії, що й випромінює. Причина цього в тому, що при великій енергії фотона не можна нехтувати втратою енергії на віддачу ядра. Випромінюючи гамма-квант, ядро згідно із законом збереження імпульсу повинно рухатися в протилежному напрямку. Поглинаючи гамма-квант, ядро вибирає в себе його імпульс і

рухається в тому ж напрямку. В оптичному діапазоні енергія віддачі маленька, і атоми зазвичай поглинають на тій же частоті, що й випромінюють.

Втрата енергії на віддачу дорівнює $E_R = \frac{E_\gamma^2}{2Mc^2}$.

де E_R - втрата енергії, E_γ - енергія гамма-кванта, M - маса ядра, c - швидкість світла у вакуумі. Видно, що втрати обернено-пропорційні масі ядра.

Ідея експерименту Мессбауера в тому, щоб використати тверде тіло замість ізольованого атома. В твердому тілі, наприклад, кристалі, завдяки квантовим явищам, рух атомів набуває колективного характеру. Енергія віддачі передається не окремим атомам, а коливанням усього кристалу - фононам. Як наслідок, маса, яка отримує віддачу, значно зростає, зменшуючи втрати енергії. Таким чином стає можливим поглинання ядром гамма-кванту, який утворився в результаті випромінювання ідентичного ядра.

Невелику різницю в енергіях, що залишається навіть при колективній віддачі, можна компенсувати завдяки ефекту Доплера, пересуваючи джерело й випромінювач один щодо одного з невеликою швидкістю. Мессбауерівські спектри зазвичай приводяться в залежності від цієї швидкості.

57. Квантування електромагнітного поля. Фотони. Енергія квантованого електромагнітного поля.

В квантовій механіці довільне поле випромінювання у вільному від зарядів об'ємі V_0 можна представити у вигляді розкладу по повному набору власних ортогональних мод. Тобто розглянемо простір (V) обмежений певними граничними умовами – резонатор. Представляємо поле у вигляді розкладу по власним модам:

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}} \sum_{\rho=\pm} (a_{\rho\vec{k}} \vec{l}_{\rho\vec{k}} e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega_{\vec{k}}t)} + a_{\rho\vec{k}}^* \vec{l}_{\rho\vec{k}} e^{-i(\vec{k}\vec{r} - \omega_{\vec{k}}t)}) \quad \nabla \vec{A} = 0; \vec{l}_{\rho\vec{k}} \perp \vec{k}; \quad \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}; \vec{H} = \nabla \times \vec{A};$$

Енергія електромагнітного поля рівна: $W = -\frac{1}{8\pi} \int (|\vec{E}|^2 + |\vec{H}|^2) dV$. Ми розглядаємо модель взаємодії атома з навколишнім середовищем, що є необхідною умовою спонтанного випромінювання. Підставляємо A в вирази для E і W :

$$\vec{E} = -\sum_{\vec{k}} \sum_{\rho} i \frac{\omega_{\vec{k}}}{c} (a_{\rho\vec{k}} \vec{l}_{\rho\vec{k}} e^{-i(\vec{k}\vec{r} - \omega_{\vec{k}}t)} - a_{\rho\vec{k}}^* \vec{e}_{\rho\vec{k}} e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega_{\vec{k}}t)});$$

$$W = \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{k}'} \sum_{\rho} \sum_{\rho'} \frac{\omega_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}'}}{4\pi c^2} \{ a_{\rho\vec{k}} a_{\rho'\vec{k}'}^* \int e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}} dV e^{i(\omega_{\vec{k}} - \omega_{\vec{k}'})t} - a_{\rho\vec{k}} a_{\rho'\vec{k}'} e^{i(\omega_{\vec{k}} + \omega_{\vec{k}'})t} \int e^{-i(\vec{k}+\vec{k}')\vec{r}} dV -$$

$$- a_{\rho\vec{k}}^* a_{\rho'\vec{k}'} e^{-i(\omega_{\vec{k}} - \omega_{\vec{k}'})t} \int e^{i(\vec{k}+\vec{k}')\vec{r}} dV + a_{\rho\vec{k}}^* a_{\rho'\vec{k}'} e^{-i(\omega_{\vec{k}} + \omega_{\vec{k}'})t} \int e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}} dV \} \vec{l}_{\rho\vec{k}} \vec{l}_{\rho'\vec{k}'};$$

$$\int_V e^{i\Delta\vec{k}\vec{r}} dV = V \delta_{\Delta\vec{k}, 0} \Rightarrow W = \sum_{\vec{k}\vec{k}'} \sum_{\rho, \rho'} \frac{\omega_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}'}}{4\pi c^2} (a_{\rho\vec{k}} a_{\rho'\vec{k}'}^* + a_{\rho\vec{k}}^* a_{\rho'\vec{k}'}) \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\rho\rho'} = \sum_{\rho\vec{k}} \sum_{\vec{k}} W_{\rho\vec{k}} \quad \text{Де:}$$

$$W_{\rho\vec{k}} = \frac{\omega_{\vec{k}}^2}{4\pi c^2} (a_{\rho\vec{k}} a_{\rho\vec{k}}^* + a_{\rho\vec{k}}^* a_{\rho\vec{k}}) - \text{енергія одної моди. Введемо узагальнені координати}$$

$$\text{імпульсу та шляху: } \theta_{\rho\vec{k}} = \sqrt{\frac{V}{4\pi c^2}} (a_{\rho\vec{k}} + a_{\rho\vec{k}}^*); \quad P_{\rho\vec{k}} = -i\omega_{\vec{k}} \sqrt{\frac{V}{4\pi c^2}} (a_{\rho\vec{k}} - a_{\rho\vec{k}}^*); \quad \text{Тоді з двох останніх}$$

формул: $a_{\rho k} = \sqrt{\frac{\pi c^2}{V}} (\theta_{\rho k} + \frac{i}{\omega_k} P_{\rho k})$; $a_{\rho k}^* = \sqrt{\frac{\pi c^2}{V}} (\theta_{\rho k} - \frac{i}{\omega_k} P_{\rho k})$ Отже ми тримуємо:

$W_{\rho k} = \frac{P_{\rho k}^2}{2} + \omega_k^2 \frac{\theta_{\rho k}^2}{2}$. Отже ми проквантували поле: -первинне квантування: за електродинамікою по модах(ортогональних) і вторинне квантування: кожна окрема мода має квантовану енергію(тобто кожна мода є гармонічним осцилятором). Слід додати що в нас буде зберігатися самоспряженність: $[x p_x] = i\hbar = [\theta P]$. Квант – один ступінь збудження моди. Навіть у випадку, якщо АМП не має збуджених фотонів, то все одно існує енергія нульових коливань вакуума: $E_{\rho k} = \hbar \omega_k (n_{\rho k} + 1/2)$ Ця рівність впливає з співвідношення невизначеності.

58. Просторова та частотна густина станів.

Знайдемо густину розподілу мод: $L_x = n_x \lambda_x$; $\delta k_x = k_x(n_x + 1) - k_x n_x = 2\pi / L_x$; $\Delta n_x = \frac{\Delta k_x}{\delta k_x} = \frac{\Delta k_x L_x}{2\pi}$

Знайдемо кількість мод в об'ємі, проекції яких лежать в інтервалі $[k, k + dk]$:

$\Delta n = \Delta n_x \Delta n_y \Delta n_z = 2 \frac{L_x L_y L_z \Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z}{(2\pi)^3}$; 2 перед дробом з'явилась за рахунок поляризації.

$\Delta n = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} k^2 \Delta k \Delta \Omega$; $\Delta n(4\pi) = \frac{V}{(2\pi)^3} 8\pi k^2 \Delta k = \frac{V k^2 \Delta k}{\pi^2}$ - Кількість мод в об'ємі, які

поширюються в тілесній кулі 4π . $\frac{dn}{dk} = \frac{V k^2}{\pi^2}$ $\frac{dn}{d\omega} = \frac{V \omega^2}{\pi^2 c^3} = \rho(V, \omega)$ - кількість мод в

одиначному інтервалі $d\omega$. $\frac{1}{\rho(V, \omega)} = \frac{d\omega}{dn} = \frac{\pi^2 c^3}{V \omega^2}$ - Міжмодова відстань на частоті ω .

59. Самоузгоджена система рівнянь взаємодії збудженого атома з квантованим полем.

Розглянемо динаміку процесу взаємодії атома з квантованим електромагнітним полем, використовуючи метод Вайскопфа-Вігнера. Оператор Гамільтона всієї системи має вигляд $\hat{H}(\vec{r}) = \hat{H}_A(\vec{r}_A) + \hat{H}_F(\vec{q}) + \hat{V}(\vec{r}_A, \vec{q})$ (12) \hat{H}_A - оператор Гамільтона атома, \hat{H}_F - оператор

Гамільтона електромагнітного поля, а $\hat{V} = \sum_{\beta} \hat{V}_{\beta}$ - оператор взаємодії атома з полем, яке

оточує атом. Процес спонтанного розпаду характеризує явище переходу енергії від початково збудженого атома до початково незбудженої системи мод поля. Система, яка відповідає процесу спонтанного розпаду у вільному просторі, може знаходитись у двох принципово різних (взаємно альтернативних) базових станах, які є власними

функціями незбуреного оператора Гамільтона $\hat{H}_0(\vec{r}) = \hat{H}_A(\vec{r}_A) + \hat{H}_F(\vec{q})$ і є взаємно

ортогональними : 1) Стан системи, коли атом є збудженим і має енергію $E_a = \hbar \omega_a$, а всі

моди поля знаходяться в вакуумних станах кожної з мод. В такому стані загальна координатна хвильова функція всієї системи є добутком хвильових функцій атома $\psi_a(\vec{r}_A)$ та хвильових функцій всіх мод поля $\phi_0(\vec{q})$ і має вигляд $\psi_{a0}(\vec{r}) \equiv \psi_a(\vec{r}_A) \phi_{\{0,0,\dots,0\}}(\vec{q})$; $\phi_{\{0,0,\dots,0\}}(\vec{q}) \equiv \prod_{\beta} \phi_{0\beta}(\vec{q})$ Нижній індекс в виразі для хвильової функції атома $\psi_a(\vec{r}_A)$ означає, що атом знаходиться в збудженому стані з енергією $E_a = \hbar\omega_a$. всі взаємно незалежні моди поля $\phi_{0\beta}(\vec{q})$ знаходяться в найнижчому (вакуумному) стані. 2) Один з великої кількості можливих однотипових станів системи, коли після завершення спонтанного переходу атом знаходиться в основному стані з енергією E_g , одна з мод поля збуджена і має енергію $E_{\alpha\beta}$, а всі інші моди поля ($\alpha \neq \beta$) знаходяться на основних рівнях $E_{n_{\alpha}=0}$. В кожному з таких станів координатна хвильова функція всієї системи має вигляд $\psi_{0\beta}(\vec{r}) = \psi_0(\vec{r}_A) \phi_{\{0,\beta,\dots,0\}}(\vec{q})$; $\phi_{\{0,\beta,\dots,0\}}(\vec{q}) = \phi_{1\beta}(\vec{q}) \prod_{\alpha \neq \beta} \phi_{0\alpha}(\vec{q})$ мода поля з номером β знаходяться в збудженому стані, а інші моди поля ($\alpha \neq \beta$) є незбудженими. За нульове значення відліку енергії системи приймемо те значення, яке відповідає знаходженню атома та всіх мод поля в основному стані. Для спрощення подальших розрахунків будемо використовувати таку шкалу відліку енергії, при якій повна енергія основного стану всієї системи рівна нулю: $E_g + \sum_{\beta} E_{n_{\beta}=0} = 0$. У відповідності з принципом суперпозиції загальна хвильова функція $\psi(\vec{r},t)$ всієї системи має вигляд $\psi(\vec{r},t) = A(t) \psi_{a0}(\vec{r}) \exp(-iE_a t/\hbar) + \sum_{\beta} F_{\beta}(t) \psi_{0\beta}(\vec{r}) \exp(-iE_{\beta} t/\hbar) = A(t) \psi_a(\vec{r}_A) \phi_{\{0,0,\dots,0\}}(\vec{q}) \exp(-iE_a t/\hbar) + \sum_{\beta} F_{\beta}(t) \psi_0(\vec{r}_A) \phi_{\{0,\beta,\dots,0\}}(\vec{q}) \exp(-iE_{\beta} t/\hbar)$ (13) В цьому виразі залежні від часу коефіцієнти $A(t)$ та $F_{\beta}(t)$ мають очевидний зміст амплітуд ймовірності знаходження атома та кожної з мод поля в момент часу t в збудженому стані. Залежна від часу зміни цих коефіцієнтів і описує процес спонтанного розпаду атома (а також процеси збудження кожної з мод поля). Еволюція всієї системи та динаміка зміни цих коефіцієнтів описується нестационарним рівнянням Шредингера

$$i\hbar \partial \psi(\vec{r},t) / \partial t = (\hat{H}_A(\vec{r}_A) + \hat{H}_F(\vec{q}) + \hat{V}(\vec{r}_A, \vec{q})) \psi(\vec{r},t) \quad (14)$$

Після підстановки в рівняння Шредингера загальної хвильової функції (13) отримаємо рівняння $i\hbar \{(\partial A / \partial t) \psi_a(\vec{r}_A) \phi_{\{0,0,\dots,0\}}(\vec{q}) \exp(-i\omega_a t) + \sum_{\beta} (\partial F_{\beta} / \partial t) \psi_0(\vec{r}_A) \phi_{\{0,\beta,\dots,0\}}(\vec{q}) \exp(-i\omega_{\beta} t)\} = \hat{V}(\vec{r}_A, \vec{q}) \{A \psi_a(\vec{r}_A) \phi_{\{0,0,\dots,0\}}(\vec{q}) \exp(-i\omega_a t) + \sum_{\beta} F_{\beta} \psi_0(\vec{r}_A) \phi_{\{0,\beta,\dots,0\}}(\vec{q}) \exp(-i\omega_{\beta} t)\}$ Це операторно-диференціальне рівняння описує процеси одночасної еволюції коефіцієнтів $A(t)$ та $F_{\beta}(t)$ і може бути перетворене в систему більш простих зв'язаних алгебраїчних рівнянь. Для цього домножимо це рівняння, відповідно, один раз на власну функцію $\psi_a^*(\vec{r}_A) \phi_{\{0,0,\dots,0\}}^*(\vec{q})$, яка відповідає збудженому стану атома і потім проінтегруємо по всій області зміни аргументів, а другий раз на одну з власних функцій $\psi_0^*(\vec{r}_A) \phi_{\{0,\beta,\dots,0\}}^*(\vec{q})$, які відповідають збудженому стану однієї з мод поля (моди номер α) і також проінтегруємо по тій же області зміни аргументів. Використовуючи ортогональність власних функцій маємо

систему рівнянь $i\hbar \exp(-i\omega_a t) \partial A / \partial t = \sum_{\beta} F_{\beta} V_{a\beta} \exp(-i\omega_{\beta} t)$, (14a) $i\hbar \exp(-i\omega_{\beta} t) \partial F_{\beta} / \partial t =$

$A V_{a\beta}^* \exp(-i\omega_a t)$ (14b) В системі (14) матричні елементи $V_{a\beta}$ енергії взаємодії атома з

квантованим полем мають вигляд $V_{a\beta} = \int \psi_a^* (\vec{r}_A) \Phi_{\{0, 0, \dots, 0\}}^* (\vec{q}) \hat{V}(\vec{r}_A, \vec{q}) \psi_0 (\vec{r}_A) \Phi_{\{0, \alpha, \dots, 0\}}^* (\vec{q}) dV_A dV_q$ (15)

Рівняння (14a) та (14b) описують динаміку нестационарної зміни амплітуд збудження атома $A(t)$ та всіх мод поля $F_{\beta}(t)$. Цю систему рівнянь будемо розв'язувати методом інтегральних перетворень Лапласа, які характеризуються правилами прямого $F_p = \int_0^{\infty} F(t)$

$\exp(-pt)dt$, (16a) та оберненого перетворень $F(t) = (2\pi i)^{-1} \int_{\delta-i\infty}^{\delta+i\infty} F_p \exp(pt)dp$, $\delta \rightarrow +0$, (16b)

довільної функції $F(t)$. Перейдемо від системи диференціальних рівнянь (14) до системи алгебраїчних рівнянь для зображень цих амплітуд. Для цього спочатку домножимо кожне з рівнянь системи (14) на величину $\exp(-pt)$, а потім проінтегруємо перетворені таким чином рівняння по змінній p в межах від 0 до ∞ . Якщо ввести лапласівські образи $A_p = \int_0^{\infty} \{A(t) \exp(-i\omega_a t)\} \exp(-pt)dt$, (17a) $F_{\beta p} = \int_0^{\infty} \{F_{\beta}(t) \exp(-i\omega_{\beta} t)\} \exp(-pt)dt$, (17b)

то після інтегрування по частинах система цих рівнянь прийме вигляд $(i\omega_a + p)A_p = A(0) + \sum_{\beta} F_{\beta p} V_{a\beta} / i\hbar$, (18a) $(i\omega_{\beta} + p)F_{\beta p} = F_{\beta}(0) + A_p (V_{a\beta}^* / i\hbar)$ (18b) Маючи на увазі

розглянути питання про спонтанний розпад початково збудженого атома в системі мод електромагнітного поля, яке знаходиться в основному (найнижчому по енергії) стані і характеризується відсутністю фотонів, покладемо $F_{\beta}(0) = 0$ (при цьому із-за виконання умови нормування повної ймовірності маємо $|A(0)|=1$). Якщо підставити в (18a)

отримане з (18b) співвідношення $F_{\beta p} = A_p [V_{a\beta}^* / i\hbar (i\omega_{\beta} + p)]$, то можна виключити з системи (18) амплітуду $F_{\beta p}$. Отримане рівняння $A_p = A(0) / \{i\omega_a + p + \sum_{\beta} |V_{a\beta}|^2 / \hbar^2 (i\omega_{\beta} + p)\}$

(19) дозволяє за допомогою оберненого перетворення Лапласа (16a) знайти шуканий розв'язок для $A(t) = (2\pi i)^{-1} \exp(i\omega_a t) \int_{\delta-i\infty}^{\delta+i\infty} A_p \exp(pt)dp = A(0)(2\pi i)^{-1} \int_{\delta-i\infty}^{\delta+i\infty} \exp[(i\omega_a + p)t]dp / \{i\omega_a + p + \sum_{\beta} |V_{a\beta}|^2 / \hbar^2 (i\omega_{\beta} + p)\}$ (20) Після заміни $p = i(\omega - \omega_a)$ цей вираз приймає вигляд $A(t) =$

$A(0)(2\pi i)^{-1} \int_{-\infty-i\delta}^{\infty-i\delta} \exp(i\omega t) d\omega / \{\omega - \sum_{\beta} |V_{a\beta}|^2 / \hbar^2 (\omega_{\beta} + \omega - \omega_a)\}$ (21) Конкретні випадки обрахування

$A(t)$ на основі (21) вимагають деталізувати явний спектр мод поля, з якими взаємодіє атом. Зараз можемо лише зауважити, що підінтегральний вираз отриманого результату (21) (з урахуванням того, що $\delta > 0$ і $\delta \rightarrow +0$) зразу визначає спектр спонтанного випромінювання атома $W(\omega) = |A(\omega)|^2 = |1 / \{\omega - \sum_{\beta} |V_{a\beta}|^2 / \hbar^2 (\omega_{\beta} + \omega - \omega_a)\}|^2$.