

Перелік питань, які виносяться на залік і відповіді до них

1. Гіпотези Планка та Ейнштейна про хвильові властивості світла та тіл

Макс Планк припустив, що випромінювання та поглинання електромагнітного випромінювання може відбуватися лише порціями з енергією $E = \hbar\omega = h\nu$, тобто мінімальною порцією енергії, де $h = 6,62 \times 10^{-27}$ ерг \times с. Згідно моделі Планка в речовині існують резонатори, що містять енергію та віддають її або цілком, або взагалі не віддають, а далі рухаються, як звичайна хвиля. Розвиток цієї теорії дав Ейнштейн, який сказав, що порції енергії не лише випромінюються, а й розповсюджуються як єдине ціле. Такі порції називаються фотонами, і їм можна приписати певний імпульс. Енергія частинки

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}, \text{ оскільки для фотона } m = 0, \text{ то } p = \hbar k, \text{ де } k - \text{хвильове число.}$$

2. Постулати теорії Бора (означення та формули)

1. Атомна система може перебувати тільки в особливих стаціонарних, або квантових станах, кожному з яких відповідає певна енергія E_n . У стаціонарному стані атом енергію не випромінює.

2. Перехід атома з одного стаціонарного стану в інший супроводжується випромінюванням чи поглинанням фотонів, енергію яких $h\nu$ визначають за формулою: $h\nu_{kn} = E_k - E_n$, де k і n - цілі числа (номери стаціонарних станів), якщо $E_k > E_n$ - фотон з частотою ν_{kn} випромінюється, якщо $E_k < E_n$ - поглинається.

3. Радіуси r_n стаціонарних станів задовольняють умову: $m\nu_n r_n = n \frac{h}{2\pi}$, де $n = 1, 2, 3, \dots, m$ - маса електрона, \hbar - зведена стала Планка. Інколи частоту випромінювання можна записати таким чином: $\nu = E_k - \frac{E_n}{h}$

Інколи частоту випромінювання можна записати таким чином: Поглинаючи світло, атом переходить із стаціонарного стану з меншою енергією в стаціонарний стан з більшою енергією. Усі стаціонарні стани, крім одного, є умовно стаціонарними. Нескінченно довго кожен атом може знаходитись лише в стаціонарному стані з мінімальним запасом енергії. Цей стан атома називається основним, всі інші - збудженими.

3. Хвилі де-Бройля

Луї де Бройль запропонував вважати, що не тільки світлу притаманні корпускулярні властивості, але і будь-якому матеріальному тілу притаманні хвильові властивості. За великим рахунком і дуже стислому вигляді можна сказати, що де Бройль постулював можливість використання формул $E = \hbar\omega$ і $P = \frac{\hbar\omega}{c} = \hbar k$ не тільки в первісному вигляді (тобто, читаючи їх справа наліво і ставлячи у відповідність хвильовому процесу з певною частотою ω і певною довжиною хвилі λ конкретну енергію та імпульс), але і у зворотному порядку:

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \lambda = \frac{h}{P}.$$

При такому трактуванні будь-якому матеріальному об'єкту, який характеризується фіксованою енергією і фіксованим імпульсом, можна поставити у відповідність хвильовий процес

(хвилю де Бройля): $\Psi(\vec{r}, t) = A \times \exp \left\{ -i \left(\frac{E}{\hbar} t - \frac{\vec{p}}{\hbar} \vec{r} \right) \right\}$ з певною частотою ω і певною довжиною хвилі λ , а також певним хвильовим вектором $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$.

Л. де Бройль за допомогою своєї ідей та правила квантування Бора-Зоммерфельда зміг легко пояснити особливості квантування в моделі Бора. Кожна з орбіт електрона є своєрідним резонатором. Умова стійкості такої системи пов'язана з просторовим резонансом для хвиль де Бройля – траєкторія буде стійкою, якщо вздовж неї вкладається ціле число хвиль де Бройля для електрона, що рухається навколо ядра.

4. Зміст хвильової функції

Фізичний зміст має квадрат модуля хвильової функції $|\Psi(x_1, x_2, \dots, x_n, t)|^2$, який є густиною ймовірності ω (для дискретних спектрів - просто ймовірність) виявити систему в положенні, описаному координатами $x_1 = x_{01}, x_2 = x_{02}, \dots, x_n = x_{0n}$ в момент часу t .

$$\omega = \frac{dP}{dV} = |\Psi(x_1, x_2, \dots, x_n, t)|^2 = \Psi^* \Psi$$

Тоді в заданому квантовому стані системи, описуваному хвильовою функцією $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_n, t)$, можна розрахувати ймовірність P того, що частинка буде виявлена в будь-якій області простору кінцевого об'єму V : $P = \int dP = \int_V \omega dV = \int_V \Psi^* \Psi dV$.

5. Загальне (в операторній формі) співвідношення невизначеності

$\langle (\Delta M)^2 \rangle \langle (\Delta L)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \left| \int \psi^*(q) (\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L}) \psi(q) dq \right|^2 = \frac{1}{4} \left| \langle [\hat{L}\hat{M}] \rangle \right|^2$, де L і M - оператори відповідних величин.

6. Співвідношення невизначеності Гейзенберга для координати та імпульсу, енергії та часу

Співвідношення невизначеності Гейзенберга для координати та імпульсу

$$\langle \Delta p_x^2 \rangle \langle \Delta x^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

Співвідношення невизначеності Гейзенберга для енергії та часу

$$\langle \Delta E^2 \rangle \langle \Delta t^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \text{ Або } \delta p_x \delta x \geq \frac{\hbar}{2}, \delta E \delta t \geq \frac{\hbar}{2} \text{ (на лекції Висоцького)}$$

Відрізняється тим, що замість дисперсій координат та імпульсу, переписали у формі співвідношення для середньоквадратичних невизначеностей цих величин ($\delta x = \sqrt{\langle (\Delta x)^2 \rangle}$).

Зміст співвідношення полягає в тому, що при будь-якому експерименті неможливо точно виміряти координату та імпульс частинки.

Об'єкт неможливо одночасно з наперед заданою точністю характеризувати і координатою, і імпульсом. При необмеженому зменшенні однієї величини, автоматично збільшується друга.

7. Стаціонарне рівняння Шредінгера в координатному представленні

Виведення з рівняння універсального вигляду $\Delta \Psi(\vec{r}) + k^2(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) = 0$

Таке рівняння описує безліч різних хвильових процесів. У випадку руху мікрочастинки її імпульс $p(\vec{r})$ пов'язаний формулою Ейнштейна $\vec{p}(\vec{r}) = \hbar \vec{k}(\vec{r})$ із хвильовим вектором $\vec{k}(\vec{r})$ і водночас може бути вираженим через повну та потенціальну енергію частинки

$p^2(\vec{r}) = 2m\{E - V(\vec{r})\} = \hbar^2 k^2(\vec{r})$. Підставляючи вираз для $k^2(\vec{r})$ у перше рівняння. Отримуємо модифіковане хвильове рівняння $\Delta\Psi(\vec{r}) + \frac{2m}{\hbar^2}\{E - V(\vec{r})\}\Psi(\vec{r}) = 0$ - стаціонарне рівняння Шредінгера. В одновимірному випадку воно має вигляд $\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\{V(x) - E\}\Psi(x)$.

8. Власні значення та власні функції. Їх властивості

Стаціонарне рівняння Шредінгера має вигляд $\Delta\psi = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0$, де ψ – хвильова функція, що є розв'язком рівняння, має зміст амплітуди ймовірності і має задовольняти таким умовам: скінченність, неперервність, однозначність, квадратична інтегрованість і нормованість.

Єдиним довільним параметром у цьому рівнянні є повна енергія E . Серед усіх можливих значень повної енергії може бути такий дискретний або неперервний набір значень E , за яких функція ψ не відповідатиме даним умовам, а можуть бути такі дискретні значення E_n (Власні значення, або власні числа), за яких конкретні розв'язки рівняння задовольнятимуть наперед ці умови. Тільки таким власним значенням відповідають реально існуючі фізичні системи. Розв'язки рівняння, які знаходяться за конкретних власних значень називають власними функціями ψ_n . Якщо власному знач E_n відповідає одна власна функція ψ_n , то такі розв'язки не вироджені. Якщо ж декілька власних функцій, то ці розв'язки вироджені.

9. Потенціальна енергія, хвильові функції та спектр енергії гармонічного осцилятора

Класичне рівняння руху частинки, описуване функцією Гамільтона $H_{\text{кл}} = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{k}{2}x^2$, де $k = \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}\right)_0$ (1) має простий вигляд $x(t) = A\cos(\omega t + \beta)$, де $\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$ (2)

В даному випадку говорять, що частинка здійснює гармонічні коливання в околі положення рівноваги, а відповідні системи називають гармонічними осциляторами.

Енергія класичних коливань гармонічного осцилятора: $E = \frac{1}{2}\mu A^2\omega^2 = \mu\omega^2\langle x^2 \rangle_{\text{кл}}$ (3)

Залежить від квадрата амплітуди $\langle x^2 \rangle_{\text{кл}} = A^2 \overline{\cos^2(\omega t + \beta)} = \frac{A^2}{2}$ (4)

Визначимо стаціонарний стан гармонічного осцилятора методами квантової механіки.

Замінімо в (1) класичні величини відповідними операторами в координатному представленні отримаємо рівняння Шредінгера. Перейдемо до безрозмірних величин

$$\xi = x\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}, \varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (5)$$

Нормовані хвильові функції стаціонарних станів гармонічного осцилятора мають вигляд $\psi_n(\xi) = [n! 2^n \sqrt{\pi}]^{-1/2} H_n(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$ (6), хвильова функція, де $H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n y}{dx^n} e^{-\xi^2}$ (7)

Використовуючи (5), знайдемо значення енергії $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$ (8), якому відповідає одна функція (6), відповідно виродження відсутнє. Енергія основного стану $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ називається нульовою енергією. Потенціальна енергія осцилятора інваріантна відносно перетворення інверсії. Стаціонарні стани підрозділяються на парні та непарні. Формулу (8) можна переписати в такому вигляді $E_n = \mu\omega^2\langle x^2 \rangle_n$

Бачимо, що енергія в класичній та квантовій теорії однаково виражаються через середнє значення квадрата відхилення від положення рівноваги.

10. Основні постулати квантової механіки

Постулат 1: кожному стану фізичної системи відповідає функція стану (хвильова функція) $\psi(q)$, яка з максимально можливою повнотою описує цей стан. Нічого іншого окрім того, що містить хвильова функція, ми не можемо знати про цю систему.

Постулат 2: кожній фізичній величині у квантовій механіці ставиться у відповідність лінійний самоспряжений (ермітовий) оператор \hat{L} .

Постулат 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 та розрахованого середнього значення (розрахованого математичного очікування), яке визначається дією $\langle L_{\text{експ}} \rangle \Leftrightarrow \langle L_{\text{розрах}} \rangle = \int \psi^* \hat{L} \psi dq$.

11. Рівняння для середніх та власних значень

Якщо задано хвильову функцію стану для деякої фізичної системи $\Psi(q)$, q – це узагальнені координати системи, і заданий оператор \hat{L} для деякої фізичної величини L , то середнє значення цієї величини шукається за формулою:

$$\langle L \rangle = \int \Psi^* \hat{L} \Psi dq$$

Нехай ми досліджуємо фізичну величину M (їй відповідає оператор \hat{M}) у конкретній фізичній системі. Тоді рівняння

$$\hat{M} \Psi_n(q) = M_n \Psi_n(q)$$

називається загальним рівнянням для визначення власних функцій $\Psi_n(q)$ і власних значень M_n оператора \hat{M} . Ці власні функції є:

скінченними $|\Psi_n(q)| < \infty$;

однозначними $\Psi_n(\varphi) = \Psi_n(\varphi + 2\pi)$;

неперервними $\Psi_n(q - \delta) = \Psi_n(q + \delta), \delta \rightarrow 0$;

взаємно ортогональними: $\int \Psi_n^* \Psi_m dq = \delta_{nm}$ – для дискретного спектра M_n і $\int \Psi_p^* \Psi_{p'} dq = \delta(p - p')$ при неперервному спектрі M_n .

Вони утворюють повну систему функцій, за якою можна розкласти будь-яку функцію, що задана в тій самій фізичній системі.

12. Самоспряженість операторів

Оператор L самоспряжений, якщо виконується умова

$$\int_V \psi_n^*(q) \hat{L}(q) \psi_m(q) dq = \int_V \psi_m(q) \hat{L}^*(q) \psi_n^*(q) dq$$

13. Умова сумісності фізичних величин

Коли оператори фізичних величин комутують, тобто виконується співвідношення

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\Psi = 0, \quad (7.50)$$

то можливе одночасне вимірювання фізичних величин цих операторів. Якщо ці оператори не комутують, тобто

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\Psi \neq 0, \quad (7.51)$$

то не можливо одночасно вимірювати відповідні фізичні величини з довільним ступенем точності. Зокрема, оператори імпульсу й координати не комутують, у чому просто впевнитись на прикладі плоскої хвилі де Бройля:

$$\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} x + x i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi = -i\hbar \Psi - i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} \Psi + i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} \Psi = -i\hbar \Psi$$

Не комутують також оператори енергії й часу (t). Некомутативність операторів є проявом співвідношень невизначеності.

14. Оператор моменту кількості руху та його властивості

$$\hat{L} = [\hat{r}\hat{p}]$$

Оператор моменту у декартовій с-мі координат та в ССК:

$$\begin{aligned}\widehat{L}_x &= y\widehat{p}_z - z\widehat{p}_y = i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial z} \right) = i\hbar \left(\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \operatorname{ctg}\vartheta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ \widehat{L}_y &= z\widehat{p}_x - x\widehat{p}_z = i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial x} \right) = i\hbar \left(\cos\varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \operatorname{ctg}\vartheta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ \widehat{L}_z &= x\widehat{p}_y - y\widehat{p}_x = i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}\end{aligned}$$

Співвідношення, які описують комутатори різних компонент моменту імпульсу і показують що жодні 2 компоненти не можуть бути точно вимірними.

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

Також можна ввести оператор квадрата моменту імпульсу(+ССК)

$$\begin{aligned}\widehat{L}^2 &= \widehat{L}_x^2 + \widehat{L}_y^2 + \widehat{L}_z^2 \\ \widehat{L}^2 &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial}{\sin\vartheta \partial \vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{\partial^2}{\sin^2 \vartheta \partial \varphi^2} \right)\end{aligned}$$

Цей оператор комутує з усіма 3-ма компонентами мом імпульсу окремо.

Також одна з компонент моменту разом з квадратом моменту є інтегралами руху, тобто вони комутують з оператором Гамільтона.

15. Нестационарне рівняння Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) \Leftrightarrow i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t),$$

де $\Psi(\vec{r}, t) = C e^{-i(\frac{E}{\hbar}t - \frac{\vec{p}}{\hbar}\vec{r})}$

16. Рівняння неперервності та закон збереження числа частинок в квантовій механіці

$$\text{Рівняння неперервності: } \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \vec{j} = 0; \quad (6.23) \quad \text{де } \vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \quad (6.22).$$

В електродинаміці це рівняння пов'язує густину розподілу електричного заряду ρ_e і густину електричного струму (густину потоку розподіленого заряду) \vec{j}_e . У даному випадку воно пов'язує густину ймовірності локалізації частинки $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 \equiv \rho$ з густиною потоку ймовірності \vec{j} . Ці дві величини характеризують тільки просторово-нестационарні зміни ймовірнісного закону розподілу частинки і не враховують фізичні характеристики, які пов'язані з цими частинками (наприклад, їх заряд).

Густина потоку, який переносить розподілену масу, має вигляд:

$$\vec{j}_m = m \vec{j}(\vec{r}, t) \equiv \frac{i\hbar}{2m} \{ \Psi(\vec{r}, t) \nabla \Psi^*(\vec{r}, t) - \Psi^*(\vec{r}, t) \nabla \Psi(\vec{r}, t) \}. \quad (6.25)$$

Закон збереження кількості частинок у нерелятивістській квантовій механіці $\frac{\partial N}{\partial t} = -\oint j_n ds$.

17. Рівняння руху для оператора

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{L}, \hat{H}] \text{ є рівнянням руху для оператора } \hat{L}(q, t).$$

18. Квантові рівняння Ньютона (теорема Еренфеста)

Із загального вигляду рівняння руху і розписавши оператор Гамільтона, отримаємо рівняння руху для оператора координати та імпульсу:

$\frac{d\hat{x}}{dt} = -\frac{i\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x} \equiv \frac{\hat{p}_x}{m}, \frac{d\hat{p}_x}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial x} = \hat{F}_x$ - дані рівняння і 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 та імпульсу:

$$\langle v_x \rangle = \frac{\langle p_x \rangle}{m} \quad \text{та} \quad \frac{d\langle p_x \rangle}{dt} = \langle F_x \rangle, \text{ які збігаються з відповідними класичними рівняннями.}$$

Тому можна зробити висновок, що із рівнянь квантової механіки безпосередньо отримують

рівняння класичної механіки, зокрема, із рівняння Шредінгера можна отримати рівняння Ньютона та Гамільтона.

19. Інтеграли руху в однорідному полі та в полі центральної сили

Інтеграли руху в однорідному полі $V = V_0 = \text{const}$. Легко впевнитись, що в однорідному полі оператор імпульсу \hat{p} комутує з оператором Гамільтона $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V_0$, тобто є інтегралом руху. Цей результат одразу випливає з вигляду відповідного комутатора $[\hat{p}, \hat{H}] = [\hat{p}, \frac{\hat{p}^2}{2m}] + [\hat{p}, V_0]$ і тієї обставини, що оператор імпульсу \hat{p} комутує як з \hat{p}^n , так і зі сталою величиною V_0 . Оскільки оператор Гамільтона завжди комутує сам із собою, то іншим інтегралом руху є енергія. Інших інтегралів руху в однорідному полі немає.

Інтеграли руху в полі центральної сили $V(r)$. Враховуючи те, що оператори всіх компонент моменту імпульсу \hat{L}_i у сферичній системі залежать тільки від кутових змінних, і тому комутують з $\hat{T}_r(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right)$, а також беручи до уваги те, що $[\hat{L}_i, \hat{L}^2] = 0$, очевидно, що будь-яка з компонент моменту імпульсу \hat{L}_i комутує з трьома складовими оператора Гамільтона: $[\hat{L}_i, \hat{H}] = 0$. Звідси усі складові моменту імпульсу \hat{L}_i є інтегралами руху в полі центральних сил. Інтегралом руху є також квадрат моменту імпульсу, оскільки оператор \hat{L}^2 також комутує з трьома складовими оператора Гамільтона. Третім інтегралом руху, як і у будь-якій консервативній системі, є енергія.

20. Інтеграли руху в атомі водню. Квантові числа

Інтеграли руху:

- L^2 – орбітальний момент;
- L_x, L_y, L_z ;
- Енергія.

Квантові числа:

- l – орбітальне квантове число, m_l – магнітне орбітальне квантове число;
- s – спінове квантове число, m_s – магнітне спінове квантове число;
- j – внутрішнє квантове число, m_j – магнітне внутрішнє квантове число;
- n – головне квантове число.

21. Вплив скінченної маси ядра на спектр рівнів енергії та хвильову функцію атома водню

Положення ядра та електрона задаються векторами \vec{r}_1, \vec{r}_2

Вводимо нові координати: $\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}, \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$

Замінивши, $\hat{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rightarrow \hat{H}(\vec{R}, \vec{r})$, шукаєм розв'язок у вигляді: $\Psi(\vec{R}, \vec{r}) = U(\vec{R})\psi(\vec{r})$.

Вийде: $U(\vec{R})$ – плоска хвиля, $\psi(\vec{r})$ – та ж сама функція що і для ідеалізованого атома Н.

Тобто: $\Psi(\vec{R}, \vec{r}) = C_1 \exp \left\{ i \frac{\vec{p} \vec{R}}{\hbar} \right\} R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$

Енергетичний спектр: $E_{np} = -\frac{Z^2 \mu e^4}{2\hbar^2} \left(1 - \frac{\mu}{M} \right) + \frac{p^2}{2M}$

Вплив скінченності маси атома характеризується двома ефектами що ведуть до зсуву частоти випромінювання і поглинання. Перший ефект – наявність приведеної маси, зменшення енергій енергетичних рівнів $\left(1 - \frac{\mu}{M} \right)$. Другий зміна кінетичної енергії атома при поглинанні випромінювання $\frac{p^2}{2M}$.

22. Орбітальний магнітний та механічний моменти атома.

Напрямок магнітного моменту визначається лише знаком магнітного квантового числа m і є однаковим для конкретного стану. Повний магнітний момент визначається як сума елементарних моментів, що відповідають усім можливим контурним струмам:

$$M_z = - \int_{V \rightarrow \infty} \frac{me\hbar}{2\mu c} |\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)|^2 dV = -m \frac{e\hbar}{2\mu c}$$

Число m також визначає величину і знак проекції моменту імпульсу електрона в атомі $L_z = m\hbar$, то використовуючи попередню формулу отримуємо гіромагнітне співвідношення для проекцій орбітальних магнітного та механічного моментів на вісь z : $M_z = -\frac{e}{2\mu c} L_z$

Вісь z була обрана довільно, отже, співвідношення буде справедливим і для моментів $\vec{M} = -\frac{e}{2\mu c} \vec{L}$.

Знак мінус показує, що моменти завжди протилежно напрямлені.

23. Гіромагнітне співвідношення

Гіромагнітними ефектами або магнітомеханічними явищами називається група явищ, обумовлена взаємним зв'язком магнітного моменту мікрочастинки з її власним кутовим (механічним) моментом кількості руху. Вони характеризуються магнітомеханічним відношенням або гіромагнітним фактором g (множником Ланде)- відношенням магнітного моменту мікрочастинки до її кутового моменту кількості руху.

$$\left| \frac{L}{M} \right| = g \frac{e}{2m_0 c}.$$

24. Як побудувати хвильову функцію при переході від одного представлення до іншого?

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 системі

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

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

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

Помножимо функцію $\Psi(x, t)$, яка задана цими розкладами, на $\Psi^*(x, t)$ і проінтегруємо отримані добутки по всій області існування $\Psi(x, t)$, враховуючи ортогональність власних функцій. Отримуємо систему еквівалентних рівнянь:

$$1 = \int |\Psi(x, t)|^2 dx = \sum_n \sum_m c_n^*(t) c_m(t) \int \Psi_n^*(x) \Psi_m(x) dx = \sum_n |c_n(t)|^2$$

$$1 = \int |\Psi(x, t)|^2 dx = \sum_\alpha \sum_\beta b_\alpha^*(t) b_\beta(t) \int \Psi_\alpha^*(x) \Psi_\beta(x) dx = \sum_\alpha |b_\alpha(t)|^2$$

(Тут враховано що $\int \Psi_n^*(x) \Psi_m(x) dx = \delta_{nm}$)

Повторюючи цю процедуру з використанням операторів різних величин можна отримати ланцюжок рівностей в якому кожен член рівний 1:

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

Рівність $1 = \int |\Psi(x, t)|^2 dx$ яка впливає з імовірнісного змісту величини $|\Psi(x, t)|^2$, має зміст повної імовірності перебування частинки де-небудь в просторі. Відповідно, зміст рівності $1 = \sum_n |c_n(t)|^2$ та-

кож впливає з імовірнісного змісту величини $c_n(t)$ і полягає в тому що повна імовірність реалізації хоча б одного з можливих значень величини A_n дорівнює 1. Тобто $|c_n(t)|^2$ - густина імовірності реалізації конкретного значення величини A . Виходячи з цих обставин можна вважати що дискретний

набір коефіцієнтів розкладу $\{c_n(t)\}$ має всі властивості хвильової функції і власне є хвильовою функцією в новому представленні (А-представленні).

25. Як побудувати оператор фізичної величини при переході від одного представлення до іншого?

Переведення $\widehat{L}(A)$ від старого A – представлення до нового B – представлення:

$\widehat{L}(A)\Psi(A) = \varphi(A)$ – загальне означення оператора. Розкладемо функції $\varphi(A)$ і $\Psi(A)$ за власними функціями $\Psi_\beta(A)$ оператора $B(A)$: (рівність зліва направо)

$$\sum_{\beta} b_{\beta}(t) \Psi_{\beta}(A) = \sum_{\beta} \widehat{L}(A) \Psi_{\beta}(A) c_{\beta}(t) \Leftarrow \begin{cases} \Psi(A, t) = \sum_{\beta} c_{\beta}(t) \Psi_{\beta}(A) \\ \varphi(A, t) = \sum_{\beta} b_{\beta}(t) \Psi_{\beta}(A) \end{cases}$$

Помножимо обидві частини рівності на $\Psi_{\alpha}^*(A)$ і проінтегруємо по всьому інтервалу зміни величини A : $\sum_{\beta} L_{\alpha\beta} c_{\beta}(t) = b_{\alpha}(t)$ (*)

Введемо величину $L_{\alpha\beta} = \int \Psi_{\alpha}^*(A) \widehat{L}(A) \Psi_{\beta}(A) dA$ – матричний елемент оператора. У рівнянні (*) матричний елемент $L_{\alpha\beta}$ оператора $\widehat{L}(A)$ переводить коефіцієнт $b_{\alpha}(t)$ кожному коефіцієнту $c_{\beta}(t)$, тобто виконує роль оператора в B – представленні.

26. Правило знаходження середніх та власних значень в матричному представленні

Розглянемо рівняння для визнач. власних функцій і власних значень у довільному А-представленні. У координатному власні функції $\varphi_n(x)$ і власні значення L_n довільного оператора $\widehat{L}_n(x)$ знаходять з:

$\widehat{L}_n(x) \varphi(x) = L \varphi(x)$ – необхідно знайти аналог цього рівняння в А-представленні, для цього треба знайти власні функції оператора $\widehat{A}(x)$:

$\widehat{A}(x) \psi_{\beta}(x) = A_{\beta} \psi_{\beta}(x)$ – нехай спектр власних значень оператора містить f величин.

$$\varphi(x) = \sum_{\beta=1}^f c_{\beta} \psi_{\beta}(x)$$

Підставимо цей вираз у перше рівняння, помножимо обидві частини на $\psi_a^*(x)$ і проінтегруємо по x :

$\sum_{\beta=1}^f L_{\alpha\beta} C_{\beta} = L C_{\alpha}$ та $L_{\alpha\beta} = \int \psi_a^*(x) \widehat{L}_n(x) \psi_{\beta}(x) dx$ – СЛАР певний аналог першого рівняння, призначення для визначення коефіцієнтів C_{α} , які є власними функціями оператора $\widehat{L}_n(A) = \{L_{\alpha\beta}\}$ в А-представленні та власних значень L цього оператора. У розгорнутому вигляді система(*):

$$\begin{aligned} C_1(L_{11} - L) + C_2 L_{12} + \dots + C_f L_{1f} &= 0 \\ C_1 L_{21} + C_2(L_{22} - L) + \dots + C_f L_{2f} &= 0 \\ \dots & \\ C_1 L_{f1} + C_2 L_{f2} + \dots + C_f(L_{ff} - L) &= 0 \end{aligned}$$

Щоб система мала нетривіальні розв'язки, потрібно, щоб визначник дорівнював нулю, розкривши визначник, отримуємо АР f -го порядку, щодо власних значень L :

$L^f + A_1 L^{f-1} + \dots + A_{f-1} L + A_f = 0$ – розв цього рівня L є власними значеннями оператора $\widehat{L}_n(A) = \{L_{\alpha\beta}\}$ в А-представленні. Якщо по черзі підставляти ці значення у систему (*), то можна знайти набір коефіцієнтів $\{C_{\alpha}\}$, що відповідають конкретним власним значенням L . Кожний з таких наборів є однією з власних функцій оператора $\widehat{L}_n(x)$ в А-представленні.

27. Вид оператора довільної величини у власному представленні

Співвідношення між конкретною фізичною величиною L та її оператором \hat{L} визначається з умови рівності експериментально вимірюваного середнього значення цієї величини в даній системі і розрахованого середнього значення (розрахованого математичного очікування), яке визначається дією

$$\langle L_{\text{експ.}} \rangle \Leftrightarrow \langle L_{\text{розн.}} \rangle = \int \Psi^* \hat{L} \Psi dq$$

Вигляд оператора довільної величини у власному представленні:

$$B_{\alpha\beta} = \int \Psi_{\alpha}^*(A) \hat{B}(A) \Psi_{\beta}(A) dA = B_{\alpha} \int \Psi_{\alpha}^*(A) \Psi_{\beta}(A) dA = B_{\alpha} \delta_{\alpha\beta}$$

28. Нестационарне рівняння Шредингера в матричному представленні

Нестационарне рівняння Шредингера, шукаємо його у А-представленні:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \hat{H}(x,t) \Psi(x,t), \text{ знаходимо власні функції оператора } A(x):$$

$\hat{A}(x) \Psi_{\beta}(x) = A_{\beta} \Psi_{\beta}(x)$. Розклад в ряд Фур'є: $\Psi(x,t) = \sum C_{\beta}(t) \Psi_{\beta}(x)$. Підставляємо у рівняння, потім домножуємо на Ψ^* і інтегруємо:

$$i\hbar \frac{\partial c_{\alpha}(t)}{\partial t} = \sum_{\beta} \hat{H}_{\alpha\beta}(t) C_{\beta}(t), \quad \hat{H}_{\alpha\beta}(t) = \int \Psi_{\alpha}^*(x) \hat{H}(x,t) \Psi_{\beta}(x) dx.$$

29. Рівняння руху оператора в матричному представленні

$$\left(\frac{d\hat{L}(t)}{dt} \right)_{\alpha\beta} = \frac{\partial L_{\alpha\beta}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{L}\hat{H}]_{\alpha\beta}$$

30. Вид операторів власного механічного та магнітного моментів. Гіромагнітне співвідношення. Матриці Паулі

Гіромагнітними ефектами або магнітомеханічними явищами називається група явищ, обумовлена взаємним зв'язком магнітного моменту мікрочастинки з її власним кутовим (механічним) моментом кількості руху. Вони характеризуються магнітомеханічним відношенням або гіромагнітним фактором g (множником Ланде)- відношенням магнітного моменту мікрочастинки до її кутового моменту кількості руху.

$$\left| \frac{L}{M} \right| = g \frac{e}{2m_0 c}. \quad (16.29)$$

Матриці Паулі- три 2×2 матриці - оператори спіну для часток зі спіном $\frac{1}{2}$.

$$\sigma_1 = \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_2 = \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_3 = \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Властивості

Матриці Паулі - ермітові оператори.

Квадрат будь-якої із них є одиничною матрицею.

Слід будь-якої із матриць Паулі дорівнює нулю.

31. Енергія спин-орбітальної взаємодії

$$\langle \Delta \hat{W}_{LS} \rangle = R_y \frac{Z^4 \alpha}{n^3} \frac{\{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\}}{l(l+1)(l+\frac{1}{2})}, \text{ де } R_y = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \approx 13.6 \text{ eV} - \text{ стала Рідберга}$$

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137} - \text{стала тонкої структури}$$

32. Принцип Паулі

Принцип Паулі: у системі ферміонів у кожний момент часу в кожному стані, який визначається повним набором квантових чисел, не може бути більше одного ферміона.

33. Статистична модель атома Томаса-Фермі (розмір атома, розподіл електронів)

Модель атома Томаса-Фермі описує просторовий *розподіл електронів у атомі*, що є наслідком дії двох механізмів – сумісної дії електричного поля ядра та поля системи атомних електронів, що приводить до появи самоузгодженого потенціалу $\varphi(r)$, а також законів квантової статистики, яка базується на принципі Паулі.

Самоузгоджений потенціал в межах атома знаходиться із *рівняння Томаса-Фермі*:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \varphi(r) = 4\pi e \frac{[2\mu e \varphi(r)]^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3}$$

Знайшовши розв'язок даного рівняння для самоузгодженого потенціалу $\varphi(r)$ можна знайти об'ємну густину електричного заряду:

$$n_e(r) = \frac{[2\mu e \varphi(r)]^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3}$$

а також функцію радіального розподілу густини електронів у атомі:

$$D_e(r) = 4\pi r^2 n_e(r)$$

Згідно зі статистичною моделлю Томаса-Фермі атом не має різких меж, що узгоджується з точним квантово-механічним аналізом. Відмінність полягає в характері спадання величини $n_e(r)$ (при точному розрахунку це експоненціальний закон $n_e(r) \sim \exp(-2Zr/a)$, де $a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$, а в статистичній моделі $n_e(r) \sim 1/r^6$) можна отримати, що 50%, усіх електронів перебувають на відстані, що не перевищує $1.33a/Z^{1/3}$. Рівняння Томаса-Фермі є некоректними як на дуже великій ($r \gg a$), так і на дуже малій відстані ($r \ll a$). Область застосування розрахунку за моделлю Томаса-Фермі обмежена інтервалом $a/Z < r < a$.