

1 Передумови виникнення квантової механіки. Теорії Планка та

Ейнштейна. Постулати Бора. Хвиля де Бройля. Існували рівняння

руху Ньютона та Лагранжа, теорія електромагнітних хвиль

Максвелла, термодинаміка та стат фізика. Існували явища, які

неможливо було пояснити: а) Природа світла – воно веде себе в

різних умовах або як потік корпускул, або як електромагнітна

хвиля. б) Існувало декілька моделей будови атома „пудингова”

модель Томпсона та модель Резерфорда, правильність якої була

підтверджена на дослідах. В моделі Резерфорда для стійкості

атома необхідно було, щоб електрон обертвся навколо ядра, але

тут теж виявився ряд парадоксів : оскільки $ze^2 / r^2 = m\omega^2 r \Rightarrow$

$\omega = \sqrt{ze^2 / r^3}$, тобто, якщо радіуси руху частинок можуть бути будь-

які, то будь якими можуть бути і частоти, хоча насправді в спектрі

випромінювання атомів спостерігалися лише певні дискретні

набори частот; крім того, під час руху частинка повинна була б

постійно випромінювати енергію і впала б внаслідок цього на ядро.

Вирішення цих проблем було вперше запропоноване Планком,

який припустив, що випромінювання та поглинання

електромагнітного випромінювання може відбуватися лише

порціями $E = nhf = nh\nu$, тобто мінімальна порція випромінюваної

енергії $E = h\nu = h2\pi\nu / 2\pi = \hbar\omega$, де $h=6.62 \cdot 10^{-27}$ ерг * с . Згідно моделі

Планка в речовині існують резонатори, що містять енергію та

віддають її або цілком, а бр 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 $E = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}$,

оскільки для фотона $m=0$, то $p = \hbar k$, де k –хвильове число.

Досліди Франка та Герца по підтвердженню теорії Планка призвели

до появи моделі атома Бора, яка базувалася на моделі Резерфорда

та постулатах Бора:

1. В атомах існують певні стаціонарні стани електронів з енергіями $E_1 \dots E_m$, в яких електрони не випромінюють та не поглинають енергію.

2. Енергія поглинається та в

ипромінюється лише при переходах електронів між цими стаціонарними станами, причому частота випромінюваного кванта світла $\omega = (E_n - E_m) / \hbar$. Стаціонарними будуть лише ті орбіти, для яких моменти імпульсу $mVr = n\hbar$, $n=1,2,\dots$. Радіус n-ої орбіти буде

рівний $r = n^2 \frac{\hbar^2}{zm\epsilon^2}$. Можна знайти частоту випромінювання при переході з рівня n на рівень m : енергія

$$E = T + V = mV^2 / 2 - ze^2 / r, \quad V = n\hbar / mr$$

підставивши сюди

формулу для стаціонарного радіусу отримаємо $V = ze^2 / n\hbar \Rightarrow$

$$E_n = -\frac{z^2 e^4 m}{2\hbar^2 n^2} \Rightarrow \omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{h} = \frac{z^2 e^4 m}{2\hbar^3} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right),$$

вцій

формулі множник, що стоїть до дужки називається сталою Рідберга. Де Бройль запропонував приписувати корпускулам

хвильові властивості, тобто, якщо $p = \hbar k = \hbar 2\pi / \lambda$, будь-яке тверде

тіло можна розглядати як хвилю довжиною $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{mv}$, та хвильовою

функцією $\psi = \psi_0 \exp(-i(\omega t - \vec{k}\vec{r}))$.

2. Статистичний характер явищ мікросвіту. Імовірнісна інтерпретація хвильової функції. Плоска хвиля не несе інформації, для передачі інформації слід формувати пакет плоских хвиль. Короткий пакет веде себе як частинка, але для коротких пакетів характерна інтерференція широкого спектру хвиль, його можна завжди розщепити по окремим частотам, але ніколи не вдавалося спостерігати лише певну частоту частинки. Ще одним недоліком такої моделі є явище дифракції та пов'язане з ним явище дисперсії. Якщо фазова швидкість пакету не залежить від частоти, то пакет не змінюється, але за наявності дисперсії пакет з часом повинен

розпливатися.
$$\psi(k, E, \omega, t) = A \exp\left(i \cdot \left(\vec{k}\vec{r} / \hbar - Et / \hbar\right)\right)$$
, де

$E = \hbar\omega$, $p = \hbar k$, повна енергія частинки

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} = mc^2 + p^2 / 2m \Rightarrow \hbar\omega = mc^2 + k^2 \hbar^2 / 2m \Rightarrow$$

$$\omega = mc^2 / \hbar + \hbar k^2 / 2m \Rightarrow \text{фазова швидкість}$$

$V_f = \omega / k = mc^2 / \hbar k + \hbar k / 2m = f(k)$. При спостереженні явищ інтерференції виявилось, що вони спостерігаються за наявності великої кількості частинок (аналогічно і для фотонів) і зникають, коли кількість частинок дуже мала. Тобто хвильові властивості мікрочастинок проявляються в статистичних закономірностях.

Макс Борн дав імовірнісну трактовку хвильової функції – її хвильовий зміст полягає в тому, що інтенсивність хвильової функції пропорційна імовірності знаходження частинки в даній області

простору: $d\omega(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2 dV \Rightarrow |\psi|^2 = d\omega / dV$, де $d\omega$ – зазначена вище

імовірність. Тобто фактично інтенсивність хвильової функції – це густина знаходження частинки у даній точці простору. Таким чином, знаючи імовірнісний зміст хвильової функції ми можемо знайти середнє значення будь-якої фізичної величини, що описує

стан частинки: $\langle F \rangle = \int |\psi(r)|^2 F(r) d^3r = \int \psi \psi^* F(r) d^3r = \int \psi^* F(r) \psi d^3r$. Треба

також зазначити, що в процесі руху частинка може описуватися великою кількістю хвильових функцій, тому для системи справджується принцип суперпозиції – якщо система знаходиться в даному місці простору в стані з хвильовою функцією ψ_1 чи ψ_2 чи ψ_m , то вона може знаходитися в стані, який є когерентною суперпозицією хвильових функцій.

3 Рівняння Шредингера як основа квантового опису мікросвіту

Одним из основных уравнений квантовой механики является уравнение Шредингера, определяющее изменение состояния квантовых систем с течением времени. Оно записывается в виде

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi, \quad (1)$$

где H – оператор Гамильтона системы, совпадающий с оператором энергии, если он не зависит от времени. Для нерелятивистского движения частицы массы μ в потенциальном поле $U(r)$ оператор \hat{H} действительный, и есть сумма операторов

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

кинетической и потенциальной энергии частицы

(2)

Вследствие наличия мнимой единицы, уравнение имеет периодические решения, и потому называется *волновым уравнением Шредингера*, а его решения – волновой функцией. Уравнение Шредингера выражает *принцип причинности* в квантовой механике, так как позволяет получить значение волновой функции $\psi(t)$ в любой последующий момент времени, если известно это значение в начальный момент времени.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2$$

Уравнение (1) удовлетворяется при волновой функцией, описывающей свободное движение частицы с определенным значением импульса и энергии. Каждая такая функция – плоская волна. Частота этой волны равна E / \hbar , а ее волновой вектор $k = p / \hbar$. Соответствующую длину волны $\lambda = 2\pi\hbar / p$ называют *де-бройлевской длиной волны частицы*. В общем случае справедливость уравнения (1) доказывается согласием с опытом всех выводов, полученных с помощью этого уравнения.

Покажем, что нормировка волновой ф-ции со временем

сохраняется. Из (1) $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) = \psi^* \hat{H} \psi - \psi \hat{H}^* \psi^*$, (6) интегрируем по всем значениям переменных и учитывая самосопряженность

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

Если в (6) подставить явное выражение для оператора Гамильтона

(2), то получим уравнение непрерывности $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0$, где

$\rho = \psi^* \psi$ - плотность вероятности (нахождения частицы в том или ином месте пространства), а \vec{j} - вектор плотности тока вероятности.

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

Условия, которым должны удовлетворять решения уравнения Шредингера, имеют весьма общий характер. Прежде всего волновая функция должна быть однозначной и непрерывной во всем пространстве. Требование непрерывности сохраняется и в тех случаях, когда само поле $U(x,y,z)$ имеет поверхности разрыва. На такой поверхности должны оставаться непрерывными как волновая функция, так и ее производные. Непрерывность последних, однако, не имеет места, если за некоторой поверхностью потенциальная энергия U обращается в бесконечность. В область пространства, где $U = \infty$, частица вообще не может проникнуть, т. е. в этой области должно быть везде $\psi = 0$. Непрерывность ψ требует, чтобы на границе этой области ψ обращалось в нуль; производные же от ψ в этом случае испытывают, вообще говоря, скачок.

Вільний рух частинок

Рух частинки
у вільному просторі.

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)\psi = 0$$

a) $E > V_0$, $\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) = k^2$

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (\text{гві хвилі})$$

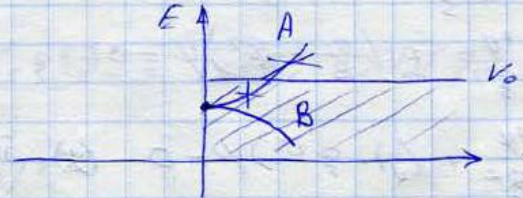
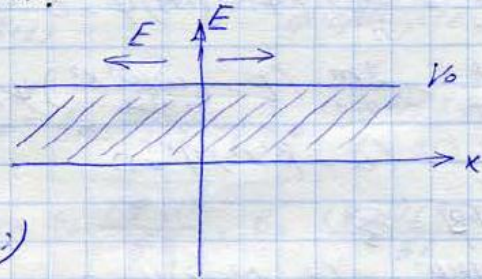
б) $E < V_0$, $\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) = \alpha^2$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)\psi = 0$$

$$\psi = Ae^{\alpha x} + Be^{-\alpha x}$$

$$A = 0$$

(в області, де існує $E < V_0$ - заборонена
путь - тунельне проходження) існує частинки
під спіненою бар'єром



4 Одномірний рух та його властивості

Если потенциальная энергия частицы зависит только от одной координаты x , то волновую функцию можно искать в виде произведения функции от y, z на функцию только от x . Из них первая определяется уравнением Шредингера свободного движения, а вторая — одномерным уравнением Шредингера

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

Прежде всего, покажем, что в одномерной задаче все энергетические уровни дискретного спектра не вырождены. Для дока-

зательства предположим противное, и пусть ψ_1 и ψ_2 — две различные собственные функции, соответствующие одному и тому же значению энергии. Поскольку обе они удовлетворяют одному и

тому же уравнению (7), то имеем $\frac{\psi_1''}{\psi_1} = \frac{2m}{\hbar^2}(U - E) = \frac{\psi_2''}{\psi_2}$; или

$$\psi_1''\psi_2 - \psi_1\psi_2'' = 0. \text{ Интегрируя находим } \psi_1'\psi_2 - \psi_1\psi_2' = \text{const}$$

Поскольку на бесконечности $\psi_1 = \psi_2 = 0$, то константа равна 0,

$$\text{отсюда } \psi_1'\psi_2 - \psi_1\psi_2' = 0$$

Интегрируя еще раз получим $\psi_1 = \text{const} \cdot \psi_2$ - по сути одинаковые функции.

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

$$x \rightarrow +\infty \text{ есть } \psi = a_1 e^{ikx} + a_2 e^{-ikx};$$

и аналогично для $x \rightarrow -\infty$. Член с e^{ikx} соответствует частице движущейся вправо, а член с e^{-ikx} - влево.

5 Приклади одномірного руху - рух в однорідному полі, випадок кусково-сталого потенціалу, потенціальні ями нескінченно великої, довільної та малої глибини.

Потенціальна яма нескінченної глибини

Потенціал $U(x)=0$ при $0 < x < a$ і нескінченність ззовні. Граничні умови

$\psi(0) = \psi(a) = 0$. Загальний розв'язок р-ня $\psi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = 0$ має

вигляд $\psi \sim \begin{pmatrix} \sin x \\ \cos x \end{pmatrix} \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x$. Умова $\psi(0) = 0$ виключає розв'язок з косинусом.

з умови $\psi(a) = 0$; $\sin \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} a = 0 \Rightarrow \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} a = \pi n$; Отже розв'язок

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n x}{a}; \quad E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2a^2 m};$$

(знайшовши з умови нормування константу)

Потенціальна яма довільної або малої глибини

В області $0 < x < a$ (в ямі) маємо р-ня Шредінгера: $\psi'' + k^2 \psi = 0$, де

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$$

В області поза ямою $\psi'' - \chi^2 \psi = 0$, де $\chi = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}$; Розв'язки цих р-нянь повинні співпадати на краях ями разом з першими

похідними. Розв'язок $\psi = A e^{\mp \chi x}$ обертається на нуль на нескінченності. Замість неперервності ψ і ψ' на межі ями, зрочно користуватися умовою неперервності ψ і логарифмічної похідної:

$$\frac{\psi'}{\psi} = \mp \chi$$

Розв'язок шукаємо у вигляді $\psi = c \sin(kx + \delta)$; З умови неперервності знаходимо

$$k \cdot \operatorname{ctg} \delta = -k \cdot \operatorname{ctg}(ak + \delta) = \chi = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} U_0 - k^2} \quad (1) \quad \text{або}$$

$$\sin \delta = -\sin(ka + \delta) = \frac{k\hbar}{\sqrt{2mU_0}} \quad \text{Виключаючи } \delta \text{ отримуємо}$$

$$ka = (n+1)\pi - 2 \arcsin \frac{k\hbar}{\sqrt{2mU_0}} \quad \text{Корені цього р-ня}$$

ня визначають енергетичні рівні $E_n = \frac{k^2 \hbar^2}{2m}$ (для $n=0,1,2,\dots$ \arcsin в межах від 0 до $\pi/2$)

$$\xi = \frac{ka}{2}; \quad \gamma = \frac{\hbar}{a} \sqrt{\frac{2}{mU_0}}; \quad \text{Для парного } n \text{ маємо } \cos \xi = \pm \gamma \xi \quad (2);$$

(беремо для яких $\operatorname{tg} \xi > 0$), а для непарного n маємо $\sin \xi = \pm \gamma \xi$;

(3) (беремо для яких $\operatorname{tg} \xi < 0$). В частинному випадку для мілкої ями для якої $U_0 \ll \hbar^2 / ma^2$ маємо $\gamma \gg 1$ і р-ня (3) не має роз'язків.

Р-ня (2) має один роз'язок $\xi \approx \frac{1}{\gamma} \left(1 - \frac{1}{2\gamma^2}\right)$. Таким образом існує

тільки один рівень $E_0 = \frac{2\xi^2 \hbar^2}{ma^2} \approx U_0 - \frac{ma^2}{2\hbar^2} U_0^2$ поблизу її верху.

Рух в однорідному полі

Сила що діє на частинку у полі E рівна $F=eE$, відповідний потенціал $U=-Fx+const$. Виберемо початок відліку так, щоб $U(0)=0$, тоді $const=0$, відповідно $U=-Fx$. Р-ня Шредінгера має вигляд

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar}(E + Fx)\psi = 0 \quad (1); \quad \text{Позначимо} \quad \xi = \left(x + \frac{E}{F}\right)\left(\frac{2mF}{\hbar^2}\right)^{1/3}; \quad \text{тоді р-}$$

ня (1) набуває вигляду $\psi'' + \xi\psi = 0$. Його розв'язок $\psi(\xi) = A\Phi(-\xi)$.

де $\Phi(\xi) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \cos\left(\frac{u^3}{3} + u\xi\right) du$; Визначимо сталу нормування A за правилом нормування власних функції неперервного

спектру $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(\xi)\psi(\xi') dx = \delta(E'-E)$. Після перетворень знаходимо

$$A = \frac{(2m)^{1/3}}{\pi^{1/2} F^{1/6} \hbar^{2/3}}.$$

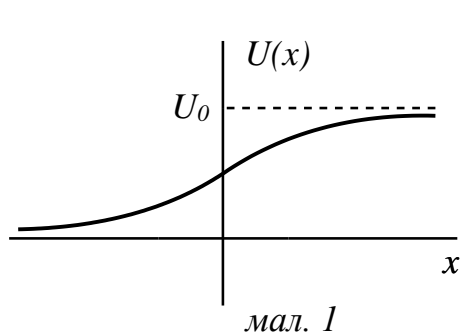
Рух в кусково-неперервному потенціалі

Кусково-неперервний потенціал описується кусково-неперервною функцією, тобто функцією майже всюди неперервною за виключенням скінченної к-сті точок розриву 1-го роду (усувний і скачок), - тобто це різного роду ступеньки, бар'єри та ін. Розв'язок таких задач зводиться до знаходження хвильових функцій на кожному інтервалі неперервності, з подальшим „склеюванням” їх за допомогою крайвих умов (неперервність хв. Функції – рівність самої функції та її першої похідної в точці склеювання).

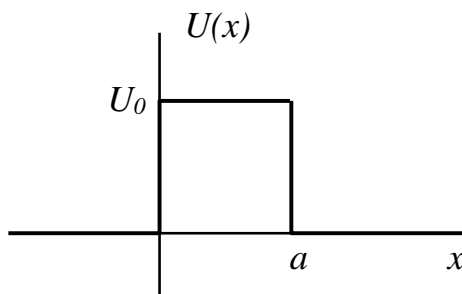
6 Тунельний ефект через прямокутний та дельта-подібний бар'єри, яма Пешля-Теллера.

Тунельний ефект через прямокутний та дельта-подібний бар'єри.

Визначимо спочатку поняття *коефіцієнтів відбиття і проходження*.



мал. 1



мал. 2

Нехай частинка рухається зліва направо в потенціалі показаному на мал 1.

Асимптотичний вигляд функції частинки що пройшла над стінкою

$$\text{при } x \rightarrow \infty \quad \psi \approx A e^{ik_2 x}; \quad k_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - U_0)}$$

$$\text{при } x \rightarrow -\infty \quad \psi \approx e^{ik_1 x} + B \cdot e^{-ik_1 x}; \quad k_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$$

(лінійна комбінація розв'язків для падаючої та відбиті хвилі)

Густина потоку в падаючій хвилі пропорційна k_1 , у відбитій $k_1 |B|^2$, а в тій що пройшла $k_2 |A|^2$. Коефіцієнт проходження – це відношення густини потоку в тій хвилі що пройшла, до потоку в

$$\text{падаючій: } D = \frac{k_2}{k_1} |A|^2$$

$$\text{Аналогічно коефіцієнт відбиття } R = 1 - D; \quad R = |B|^2 = 1 - \frac{k_2}{k_1} |A|^2$$

Задача про проходження через прямокутний бар'єр (мал 2.)

Прямокутний бар'єр описується потенціалом :
$$\begin{cases} 0, x < 0 \\ U_0 > 0, 0 < x < a \\ 0, x > a \end{cases}$$

Слід розглянути 2 випадки коли E більше і менше U_0

Розв'язки: для $x < 0$: $e^{ik_1x} + A \cdot e^{-ik_1x}$; для $x > a$:

$$C e^{ik_1x} \quad k_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} ;$$

Для області $0 < x < a$: при $E < U_0$: $S e^{\chi x} + S' e^{-\chi x}$ ($\chi = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}$)

при $E > U_0$: $B e^{ik_2x} + B' e^{-ik_2x}$

$$(k_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - U_0)}) ;$$

Всі сталі як завжди знаходяться з умов неперервності в точках 0 і а

Коефіцієнт проходження в цьому випадку $D = k_1 |C|^2 / k_1 = |C|^2$;

Таким чином :

$$D = \frac{4k_1^2 k_2^2}{(k_1^2 - k_2^2) \sin^2 a k_2 + 4k_1^2 k_2^2} ; \text{ для } E > U_0$$

$$D = \frac{4k_1^2 \chi^2}{(k_1^2 + \chi^2) \sinh^2 a \chi + 4k_1^2 \chi^2} ; \text{ для } E < U_0$$

З останнього р-ня випливає ненульовість коефіцієнту проходження, коли енергія частинки менша за висоту потенціального бар'єру. Це явище носить назву *тунельного ефекту* . Це явище пов'язане з хвильовими властивостями частинки і не має аналогу в класичній механіці.

Задача з дельта-подібним бар'єром

Вигляд потенціалу
$$V(x) = \frac{\hbar^2}{m} \Omega \delta(x);$$

Розв'язок р-ня Шредінгера всюди крім малої області навколо $x=0$:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}; \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2};$$

або інакше
$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0 \\ (1+F)e^{ikx}, & x > 0 \end{cases}$$
 (якщо амплітуду падаючої хвилі прийняти за 1)

крайові умови $\psi(+0) = \psi(-0); \quad \psi'(+0) - \psi'(-0) = 2\Omega\psi(0);$ З цих умов знаходимо:

$$ik(1+F) - ik(1-B) = 2\Omega(1+B); \quad B = F = \frac{\Omega}{ik - \Omega};$$

Отже $|B|^2 = \frac{\Omega^2}{\Omega^2 + k^2}$ - інтенсивність відбитої хвилі; $|1+F|^2 = \frac{k^2}{\Omega^2 + k^2}$ - інтенсивність хвилі що пройшла.

Яма Пешля-Теллера

Розв'язати рівняння Шредінгера з потенціалом

$$V(x) = \frac{1}{2}V_0 \left[\frac{\chi(\chi-1)}{\sin^2 \alpha\chi} + \frac{\lambda(\lambda-1)}{\cos^2 \alpha\chi} \right], \quad V_0 = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{m},$$

де $\chi > 1$ і $\lambda > 1$. Обмежимо розглядом інтервалу $0 \leq x \leq \frac{\pi}{2\alpha}$, на межах якого потенціал $V(x)$ перетворюється в нескінченність.

Розв'язуємо рівняння Шредінгера з граничними умовами.

$$u = 0 \text{ при } x = 0 \text{ і } x = \frac{\pi}{2\alpha}$$

Шляхом заміни $y = \sin^2 \alpha x$ зводимо рівняння до вигляду

$$y(1-y)u'' + \left(\frac{1}{2} - y\right)u' + \frac{1}{4} \left[\frac{k^2}{\alpha^2} - \frac{\chi(\chi-1)}{y} - \frac{\lambda(\lambda-1)}{1-y} \right] u = 0, \quad \text{де } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Це диференційне рівняння має три регулярні особливі точки, $y = 0, 1, \infty$, тому робимо підстановку

$$u = y^\mu (1-y)^\nu f(y), \quad \mu = \frac{\chi}{2}, \quad \nu = \frac{\lambda}{2}$$

зводимо рівняння до гіпергеометричного

$$y(y-1)f'' + \left[\left(\chi + \frac{1}{2}\right) - y(\chi + \lambda + 1) \right] f' + \frac{1}{4} \left[\frac{k^2}{\alpha^2} - (\chi + \lambda)^2 \right] f = 0$$

Цьому рівнянню відповідають наступні формули для власних значень

$$k^2 = \alpha^2 (\chi + \lambda + 2n)^2 \quad \text{або} \quad E_n = \frac{1}{2} V_0 (\chi + \lambda + 2n)^2$$

Криві потенціальної енергії на малюнку.

Якщо $2n \gg \chi + \lambda$, то власні значення наближено записуються формулою $k^2 = 4\alpha^2 n^2$, що відповідає випадку прямокутної ями.

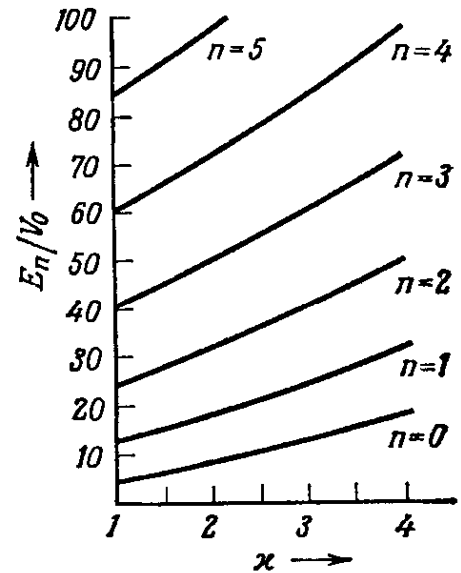
Поблизу мінімуму криву потенціальної енергії можна замінити параболою.

Заміна $z = \chi - \frac{\pi}{4\alpha}$

$$V = 4V_0 \lambda (\lambda - 1) \left[\frac{1}{2} + \alpha^2 z^2 + O(z^4) \right]$$

$$\omega = 2\sqrt{2\lambda(\lambda-1)} \frac{\hbar}{m} \alpha^2$$

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) + 2V_0 \lambda (\lambda - 1)$$



Ф и г. 23. Зависимость энергетических уровней от параметра асимметрии χ для потенциалов Пешля — Теллера с $\lambda = 2$.

7 Гармонічний осцилятор (одно та тривимірний)

Потенціальна енергія лінійного осцилятора має вигляд

$$U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}; \text{ р-ня Шредінгера: } \psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \psi(x) = 0;$$

Позначимо $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$, $\varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$. В цих позначеннях:

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

Розв'язок шукаємо у вигляді $\psi(\xi) = v(\xi)e^{-\xi^2/2}$; підставляючи

$$\frac{d^2v(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dv(\xi)}{d\xi} + (\varepsilon - 1)v(\xi) = 0;$$

Розв'язок представимо у вигляді ряду

по ступенях ξ : $v(\xi) = \sum_r a_r \xi^r$; підставляючи отримуємо рекурентну

$$\text{ф-лу: } a_{r+2} = \frac{2r+1-\varepsilon}{(r+1)(r+2)} a_r \text{ тобто є 2 незалежних розв'язків для парних}$$

і непарних r . При $\xi \rightarrow \infty$ функція v поводить себе як e^{ξ^2} , (при $\varepsilon \neq 2n+1$) – що з фізичної точки зору недопустимо. При виконанні

умови $\varepsilon = 2n+1$ розв'язок можна предстанити у вигляді поліномів

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

Використовуючи рекурентну властивість $\frac{dH_n(\xi)}{d\xi} = 2nH_{n-1}(\xi)$ та

інтегральну властивість $\int_{-\infty}^{+\infty} H_n(x)e^{-x^2} e^{ipx} dx = i^n \sqrt{\pi} \cdot p^n \cdot e^{-\frac{p^2}{4}}$ отримаємо

$$\text{остаточно значення енергії осцилятора } \boxed{E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)}$$

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)

Тривімірний гармонічний осцилятор

Дано потенціал $U = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$

Рівняння Шредінгера для частинки в полі $U = \frac{1}{2}m\omega^2 (x^2 + y^2 + z^2)$ допускає розділення змінних, що приводить до трьох рівнянь лінійного осцилятора. Тому рівні енергії нам вже відомі $E = \hbar\omega \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right) \equiv \hbar\omega \left(n + \frac{3}{2} \right)$. Кратність виродження n-го рівня рівна числу способів, якими n може бути представлено у вигляді суми цілих невід'ємних чисел; воно дорівнює $\frac{(n+1)(n+2)}{2}$. Хвильові функції стаціонарних станів. $\psi_{n_1 n_2 n_3} = const \cdot \exp\left(-\alpha^2 r^2 / 2\right) H_{n_1}(\alpha x) H_{n_2}(\alpha y) H_{n_3}(\alpha z)$, де $\alpha = \sqrt{m\omega/\hbar}$.

При зміні знака координати поліном H_n множиться на $(-1)^n$. Співставляючи лінійні комбінації цих функцій з заданою сумою $n = n_1 + n_2 + n_3$, можна утворити функції

$\psi_{nlm} = const \cdot r^l \exp\left(-\alpha^2 r^2 / 2\right) Y_{lm}(\theta, \phi) F\left(-\frac{n-1}{2}, l + \frac{3}{2}, \alpha^2 r^2\right)$, де F –

вироджена гіпергеометрична функція, $|m| = 0, 1, \dots, l$, а l пробігає значення $0, 2, \dots, n$ для парних n і $1, 3, \dots, n$ для непарних n . Цим визначаються доступні значення орбітального моменту.

Послідовність рівнів просторового осцилятора:

$(1s), (1p), (1d, 2s), (1f, 2p), (1g, 2d, 3s), \dots$, в дужках взаємовироджені стани.

8 Постулати квантової механіки

1. Довільному стану фізичної системи відповідає функц. стану (хвильова), яка з максимальною повнотою характеризує цей стан. Ψ має зміст амплітуди ймовірності, в силу цього є скінчена, неперервна, квадр. інтегровна. Якщо існують стани $\psi_1 \dots \psi_n$, то $\exists \Psi = \sum_n C_n \psi_n$ в силу принципу суперпозиції.

2. Довільній фізичній величині в квантовій мех-ці відповідає

лінійний самоспряжений (єрмітів) оператор $\hat{L}\psi(x) = \varphi(x)$
Лінійний, бо один із положень квант.мех. є принцип

суперпозиції. Умова самоспряженості: $\int \psi_n^* \hat{L} \psi_m dx = \int \psi_m \hat{L}^* \psi_n^* dx$
Тільки самоспряжені оператори мають дійсні власні числа.

3. Співвідношення фіз. величини конкретному операторує прав.

тоді, коли $\bar{L}_{\text{експ}} = \bar{L}_{\text{розр}} = \int \psi^* \hat{L} \psi dx$

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.

Зображення фізичних величин лінійними самоспряженими операторами

Див постулат 2 та питання просто власні ф-її та власі значення оператора.

Власні функції та власні значення оперетора. 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 хвильову функцію стану

в якому фізична величина має значення f_n через ψ_n - *власні функції*. Для них в загальному випадку виконується умова

нормування: $\int |\psi_n|^2 dq = 1$. Як наслідок принципу суперпозиції

маємо: $\psi = \sum_n C_n \psi_n$ Де також $\sum_n |C_n|^2 = 1$ Отже, $\sum_n C_n C_n^* = \int \psi \psi^* dq$ 3

іншого боку $\int \psi \psi^* dq = \sum_n C_n^* \int \psi_n^* \psi dq$ Маємо: $\sum_n C_n C_n^* = \sum_n C_n^* \int \psi_n^* \psi dq$ Звідки

$C_n = \int \psi \psi_n^* dq \Rightarrow C_n = \sum_m C_m \int \psi_m \psi_n^* dq$ 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 $\psi = \psi_n$ тобто є власною, то

$\hat{f}\psi_n = f_n \psi_n$ Тобто для знаходження власних власних функцій

системи необхідно вирішити р-ня $\hat{f}\psi = f\psi$

9 Оператори імпульсу, енергії, моменту кількості руху.

$\hat{P}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ - оператор імпульсу. Побудуємо тепер оператор кін

енергії: $T = \frac{p^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} \Rightarrow \hat{T} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m}$ Підставляємо оператор

імпульсу і маємо: $\hat{T} = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta$ Нехай $\hat{V} = \hat{V}(x)$ - оператор

потенціальної енергії. Тоді повна енергія: $\hat{H} = \hat{E} = \hat{T} + \hat{V}$ - Гамільтоніан.

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 квантовій механіці виникає в результаті одночасного виміру повного набору фізичних величин. Під станом ми будемо розуміти стани, які можна описати повним чином. Див постулат 1.

Комутативність операторів і сумісність фізичних величин

$\widehat{LM}\psi - \widehat{ML}\psi = (\widehat{LM} - \widehat{ML})\psi = [\widehat{LM}]\psi$ Операція комутації:

$(\widehat{LM} - \widehat{ML}) = [\widehat{LM}]$ Якщо $[\widehat{LM}] = 0$ то кажуть, що оператори комутують.

Наприклад $[x\hat{p}_x]\psi = -i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} + i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} + i\hbar \psi = i\hbar \psi$ отже оператори

імпульсу та координати не комутують. $[x\hat{p}_y] = 0$ та

$[\hat{p}_x\hat{p}_y] = 0$ Дивись ще питання з загальним співвідношенням невизначеності Гейзінберга.

10 Загальне співвідношення невизначеності, його зміст, інтерпретація та наслідки. Випадки координати, імпульсу, часу та енергії.

$\Delta \bar{L}^2 = \int (\bar{L} - \hat{L})\psi(\bar{L} - \hat{L}^*)dx$, $\Delta \bar{M}^2 = \int (\bar{M} - \hat{M})\psi(\bar{M} - \hat{M}^*)dx$ Покажемо, що дві величини можуть бути точно виміряні якщо їх оператори комутують. $\psi(x): \hat{L}\psi_n = L_n\psi_n$, $\hat{M}\psi_n = M_n\psi_n$ - щоб можна було однозначно виміряти.

$$(\hat{M}\hat{L} - \hat{L}\hat{M})\psi_n = L_n\hat{M}\psi_n - M_n\hat{L}\psi_n = L_nM_n\psi_n - M_nL_n\psi_n = 0 \quad \text{Знайдемо}$$

$$\Delta \bar{L}^2 \Delta \bar{M}^2 \quad \text{Нехай} \quad \Delta \bar{L}^2 = \int U U^* dx, (\bar{L} - \hat{L})\psi = U; \quad \text{та} \quad \Delta \bar{M}^2 = \int V V^* dx, (\bar{M} - \hat{M})\psi = V;$$

Розглянемо такий інтеграл: $I = \int |\alpha U + iV|^2 dx \geq 0$, де α - дійсний параметр.

Далі маємо:

$$I = \int (\alpha U + iV)(\alpha U^* - iV^*) dx = \underbrace{\alpha^2 \int |U|^2 dx}_A + \underbrace{\alpha i \int (VU^* - V^*U) dx}_B + \underbrace{\int |V|^2 dx}_C \geq 0$$

За теоремою про корені р-ня (за α - дійсний) маємо: $4AC \geq B^2$ підставляємо і маємо:

$$\int |U|^2 dx \int |V|^2 dx \geq \frac{1}{4} \left(i \int (VU^* - V^*U) dx \right)^2 \Rightarrow \Delta \bar{L}^2 \Delta \bar{M}^2 \geq \frac{1}{4} \left| \int (VU^* - V^*U) dx \right|^2$$

Розпишемо праву частину цієї нерівності:

$$\int (V^*U - VU^*) dx = \int \left\{ (\bar{M} - \hat{M}^*)\psi^* (\bar{L} - \hat{L})\psi - (\bar{M} - \hat{M})\psi (\bar{L} - \hat{L}^*)\psi^* \right\} dx =$$

$$\int \left\{ \bar{M}\psi^* \bar{L}\psi - \bar{M}\psi^* \hat{L}\psi - \hat{M}^*\psi^* \bar{L}\psi + \hat{M}^*\psi^* \hat{L}\psi - \bar{M}\psi \bar{L}\psi^* + \bar{M}\psi \hat{L}^*\psi^* + \bar{M}\psi \bar{L}\psi^* - \hat{M}\psi \hat{L}^*\psi^* \right\} dx =$$

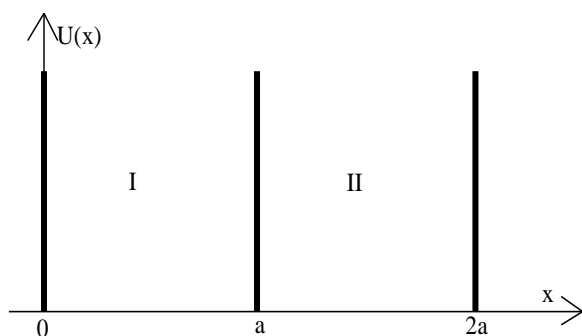
$$\int \hat{M}^*\psi^* \hat{L}\psi dx - \int \hat{M}\psi \hat{L}^*\psi^* dx \Rightarrow \int \psi^* (\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L})\psi dx = - \int \psi^* [\hat{L}\hat{M}] \psi dx ,$$

отже: $\Delta \bar{L}^2 \Delta \bar{M}^2 \geq \frac{1}{4} \left| \int \psi^* [\hat{L}\hat{M}] \psi dx \right|^2$ в загальному вигляді маємо:

$$\Delta \bar{L}^2 \Delta \bar{M}^2 \geq \frac{[\hat{L}\hat{M}]^2}{4}$$

Тобто можна точно виміряти \hat{L} та \hat{M} при умові якщо вони комутують.

Рух частинок в періодичному потенціалі. Гребінка Дірака. Зонна структура спектру дозволених рівнів енергії.



Рух в періодичному потенціалі суттєво відрізняється від руху в потенціальній ямі – в спектрі з'являються зони. Варто лише згадати модель Кронінга-Пенні (це модель руху електронів в середині кристала,

$$U(x) = \alpha \theta(x + nb) \theta(nb - x + a)$$

Розглянемо рух частинок в періодичному потенціалі на прикладі гребінки Дірака. Гребінка Дірака – це потенціал виду

$$U(x) = \alpha \delta(x + na), \text{ де } n - \text{ціле число.}$$

Запишемо граничні умови для зв'язку р-ня Шредінгера.

$$\psi_I(a - 0) = \psi_{II}(a + 0)$$

$$\psi'_I(a - 0) - \psi'_{II}(a + 0) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(a)$$

До них можна додати ще умову періодичності $\psi(x) = \psi(x + na)$.

Періодичність можна описати за допомогою оператора трансляції:

$$\hat{T}_a \psi(x) = \psi(x + a) \text{ . Він має власні значення: } \hat{T}_a \psi(x) = C(a) \psi(x) \text{ . В}$$

даному випадку вони врівні $\exp(ikx)$. Розв'язки р-ня Шредінгера шукатимемо у вигляді:

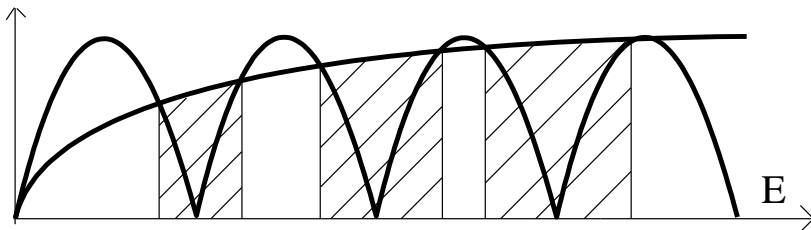
$$\psi_I = A \exp(i\lambda x) + B \exp(-i\lambda x)$$

$$\psi_{II} = \exp(ikx) [A \exp(i\lambda x) + B \exp(-i\lambda x)], \quad \lambda = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Далі – розв'язуємо цю систему р-нянь з урахуванням граничних умов. Розв'язок зводиться до трансцендетного тригонометричного р-ня. Ліва частина якого періодична функція, графік якої нагадує гребінку, а права частина – монотонно зростаюча ф-я.

Використовуючи оцінки тригонометричних функцій (типу

$\sin(x) \leq 1$) отримуємо, що за умови періодичності потенціалу утвор. зони:



Як і в моделі Кронінга-Пенні тут ми спостерігаємо розширення дозволених і звуження заборонених зон із збільшенням енергії.

11 Зміна стану частинок у часі. Нестационарне рівняння Шредінгера.

Коли ми говорили про нестационарне р-ня Шредінгера, ми не враховували час. За першим постулатом КМ ми не можемо знати більше, ніж хвильову функцію. Тому інформацію про зміну системи в часі ми можемо почерпати лише з самої функції. Введемо оператор еволюції:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{L} \psi$$

Так як у нас взаємооднозначна відповідність операторів і величин, то ми можемо знайти оператор \hat{L} у конкретному випадку. Розглянемо плоску хвилю:

$$\psi = A_0 \exp\left(i \frac{\vec{p}}{\hbar} \vec{r} - \frac{E}{\hbar} t\right) \quad \text{Подіємо оператором } \hat{L} \text{ на функцію } \psi :$$

$$\hat{L} \psi = -\frac{1}{i\hbar} E \psi$$

$$\text{Звідки: } \hat{L} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H}$$

Таким чином ми отримали нестационарне рівняння Шредінгера:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi \quad \text{Для його розв'язку нам потрібно 2 граничні умови і 1-ну початкову.}$$

Рівняння неперервності для густини струму ймовірності.

Запишемо нестационарне р-ня Шредінгера для функцій Ψ та Ψ^* . Перше домножимо на Ψ^* , а друге – на Ψ . Потім віднімемо 2 рівняння:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right) \Psi \quad | \quad \Psi^*$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right) \Psi^* \quad | \quad \Psi$$

Отримаємо:

$$i\hbar \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} (\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^*) + (\Psi^* V \Psi - \Psi V \Psi^*)$$

Дужка в лівій частині рівності – це похідна по часу від модуля квадрата функції Ψ . Другий доданок в правій частині рівний нулю.

Таким чином отримаємо:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \quad | \quad \frac{1}{i\hbar}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 + \nabla \left[\frac{i\hbar}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \right] = 0$$

Позначимо $|\Psi|^2 = \rho$, а вираз в квадратних дужках як \vec{j} : $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \vec{j} = 0$

Ми отримали *рівняння неперервності*. В електродинаміці ρ – це густина заряду, \vec{j} – густина струму. В КМ ρ – густина ймовірності, \vec{j} – густина потоку ймовірності.

12 Стаціонарні розв'язки.

Нехай маємо нестаціонарне р-ня Шредінгера:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi \quad \text{В стаціонарному випадку} \quad \hat{H} \neq f(t)$$

Застосуємо метод розділення змінних. Будемо шукати розв'язки у

вигляді: $\psi(x, t) = X(x)T(t)$

Тоді:

$$i\hbar X \frac{\partial T}{\partial t} = \hat{H}(x)XT \quad \left| \frac{1}{XT} \right. \Rightarrow i\hbar \frac{T_t}{T} = \frac{\hat{H}(x)X}{X} = \alpha$$

Вирази по обидві сторони рівності залежать від різних змінних.

Тому для виконання рівності необхідно, щоб вони дорівнювали

константі α . Таким чином нестаціонарне р-ня розбивається на 2 диф. р-ня:

1) $\hat{H}(x)X(x) = \alpha X(x)$ - стаціонарне р-ня Шредінгера,

звідки $X(x) = \psi_n(x)$, $\alpha = E_n$, $n = 0, 1, 2, \dots$

2) $-i\hbar T_t = \alpha T = E_n T$ звідки

$$T(t) = c \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right)$$

Константа C знаходиться з умов нормування функції

$$\Psi : \psi(x, t) = XT = \psi_n(x) \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right)$$

Отже, хвильова функція швидко осцилює (навіть у стаціонарному випадку). Але це не призводить до парадоксів. Так як фізичний смисл мають лише модуль квадрат хв. функції величини.

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

Нестационарне рівняння Шредінгера – це рівняння руху для хв. функцій:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$$

Кожній величині в КМ відповідає оператор: $L \rightarrow \hat{L}$. Для середнього (усереднення в об'ємі V) значення величини маємо:

$$\bar{L}(t) = \int_V \psi^*(x, t) \hat{L}(x, t) \psi(x, t) dx$$

Візьмемо повну похідну по часу:

$$\frac{d\bar{L}}{dt} = \int \left\{ \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{L}\psi + \psi^* \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \psi + \psi \hat{L} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right\} dx \Rightarrow \text{врахуємо, що}$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H}\psi \quad \text{та} \quad \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \hat{H}\psi^*$$

$$\Leftarrow \int \psi^* \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \psi dx + \frac{1}{i\hbar} \left\{ \int \psi^* \hat{L} \hat{H} \psi dx - \int \hat{H} \psi^* \hat{L} \psi dx \right\} \Rightarrow$$

Перетворимо два останні інтеграли так, щоб було $\int \psi^* \dots \psi dx$.

Для цього застосуємо властивість ермітовості операторів:

$$\int \psi_1^* \hat{A} \psi_2 dx = \int \psi_1 \hat{A}^* \psi_2^* dx$$

$$\int \hat{H}^* \psi^* \hat{L} \psi dx = \int \hat{L} \psi \hat{H}^* \psi^* dx = \int \psi^* \hat{H} \hat{L} \psi dx$$

отже,

$$\Leftarrow \int \psi^* \left\{ \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} (\hat{L} \hat{H} - \hat{H} \hat{L}) \right\} \psi dx$$

Таким чином: $\frac{d\bar{L}}{dt} = \int \psi^* \left\{ \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{L}\hat{H}] \right\} \psi dx$ Ми хочемо знайти $\frac{d\hat{L}}{dt}$

Маємо: $\frac{d\bar{L}}{dt} = \int \psi^* \frac{d\hat{L}}{dt} \psi dx$ Так як диверенціювання і усереднення

йде по різним змінним (t і x), то $\frac{d\bar{L}}{dt} = \overline{\frac{dL}{dt}}$ І остаточно отримаємо

правило для диференціювання операторів: $\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{L}\hat{H}]$

14 Теорема Еренфеста. Квантові рівняння Ньютона.

Чи можемо ми виходячи з КМ отримати р-ння Ньютона? – Звичайно можемо!

1) Нехай $\hat{L} = \hat{X}$

Застосуємо правило диференціювання операторів:

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{\partial \hat{x}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{x}\hat{H}] = \frac{1}{i\hbar} [\hat{x}\hat{H}], \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x)$$

Комутатор $[\hat{x}\hat{H}]$ легко знаходиться: $[\hat{x}\hat{H}] = \frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial}{\partial x}$

Таким чином:

$$\frac{d\hat{x}}{dt} \psi = \frac{1}{i\hbar} \frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial}{\partial x} \psi$$

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{m} \left(-\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) = \frac{1}{m} \hat{p}_x$$

$$\hat{p}_x = m \frac{d\hat{x}}{dt} = m\hat{v}$$

Якщо від операторів перейти до середніх величин, то

$$p_x = mv_x$$

1) Нехай тепер $\hat{L} = \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ застосуємо до цього випадку аналогічну процедуру.

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{p}_x = 0 \quad \frac{d\hat{p}_x}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{p}_x \hat{H}] = \frac{1}{i\hbar} \left(-i\hbar \frac{\partial V}{\partial x} \right) \text{ .отже, } \frac{d\hat{p}_x}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial x} = \hat{F}_x \text{ якщо}$$

перейти до середніх величин, то : $\frac{dp_x}{dt} = F_x$

15 Інтеграл руху в кантовій механіці - випадок однорідних полів

Інтегралами руху в класичній фізиці наз. величини, які не

змінюються у часі. $\frac{dL}{dt} = 0$

Означення: В КМ оператор \hat{L} наз. 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 ($V = \text{const}$).

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.

Розглянемо випадок 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, що

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

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

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

Оскільки у нас центральна симетрія, то перейдемо до сферичних

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

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

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

координат: $z = r\cos\theta$ Тоді $\hat{L}_z = i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi}$

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

Запишемо вираз для кінетичної енергії:

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

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} \quad \text{Відповідно функція}$$

Гамільтона: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + \hat{V}$ Знайдемо інтеграли руху:

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

б) E : - зберігається енергія. $[\hat{E}, \hat{H}] = 0$

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

невизначеності: $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk}$, $i \neq j$ Ми не можемо точно знайти

одночасно \hat{L}_x, \hat{L}_y та \hat{L}_z . Вихід: прийняти наприклад \hat{L}_z інтегралом руху.

Розглянемо випадок аксіально-симетричних полів.

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

16 Рух частинки у центральній симетричному полі.

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:

$$H\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (1) \text{ для того, щоб знайти власні функції } \psi_1, \psi_2$$

скористаємося функцією Гамільтона: $H = \hat{T}_r + U(\vec{r}) \quad (2)$, де

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \text{ . Запишемо потенціальну енергію:}$$

$$\hat{T}_r = \frac{1}{2m} (\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \quad (3) \text{ . В зв'язку з}$$

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:

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

$$\Delta_{\theta, \varphi} = \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (5) \quad \hat{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\theta, \varphi} \quad (6) \text{ . В сфер.}$$

координатах Гамільтоніан (2) набуде вигляду :

$$\hat{T}_r = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \quad (7) \quad \tilde{U}(r) = U(r) - \frac{\hbar^2}{2mr^2} \Delta_{\theta,\varphi} = U(r) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} \quad (8)$$

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

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. $\psi(\vec{r}) = R(r)l(\theta, \varphi)$ (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 \hat{L}^2 :

$$\hat{L}^2 l(\theta, \varphi) = L^2 l(\theta, \varphi) \quad (10). \text{ Для цього скористаємось явним виглядом}$$

(6) і (5). Розв'язки цього р-ня добре відомі: $-\hbar^2 \Delta_{\theta,\varphi} l(\theta, \varphi) = L^2 l(\theta, \varphi)$

Розв'язком є будь-яка із сферичних ф-цій:

$$l(\theta, \varphi) = Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l \quad \text{Явний вигляд}$$

сферичної ф-ції:

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

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

(11) задовольняє умові ортонормованості

$$\left\{ P_l(\xi) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d\xi^l} (1-\xi^2)^l \right\} \quad (12), \quad \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{lm}(\theta, \varphi) Y_{l'm'}(\theta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (13).$$

l, m – називаються орбітальним і магнітним квантовими числами. Ф-ція (11) є також власною для оператора проекції орбітал. момента

$$L_z : \hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \psi} \quad \hat{L}_z Y_{l,m}(\theta, \varphi) = L_z Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (14) \quad L_z = \hbar m, m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

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

В результаті виконуються дві умови:

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

17 Розщеплення хвильової ф-ції на радіальну та кутову частини.
 Запишемо р-ня Шредінгера (рух центра мас не враховується) для частинки в центральному полі:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta \Psi(\vec{r}) + U(r)\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \quad (17) \text{ де } \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \text{ - приведена маса.}$$

Врахувавши гамільтоніан $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + U(r)$ і гамільтоніан в

сферичних координатах $\hat{H} = \hat{T}_r + \frac{1}{2\mu r^2} \hat{L}^2 + U(r)$, де

$$\hat{T}_r = -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right), \text{ запишемо його у вигляді}$$

$$\hat{T}_r \Psi(\vec{r}) + \frac{1}{2\mu r^2} \hat{L}^2 \Psi(\vec{r}) + U(r)\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \quad (18), \text{ що дає змогу відокремити}$$

змінні. Для цього хвильову ф-цію

$\Psi(\vec{r})$ запишемо як добуток

радіальної ф-ції $R(r)$ та сферичної

ф-ції $Y(\theta, \varphi)$: $\Psi(\vec{r}) = R(r)Y(\theta, \varphi)$ (19)

при підстановці (19) до (18) слід

урахувати, що оператор \hat{T}_r діє лише на ф-цію $R(r)$, а оператор \hat{L}^2

- на ф-цію $Y(\theta, \varphi)$.

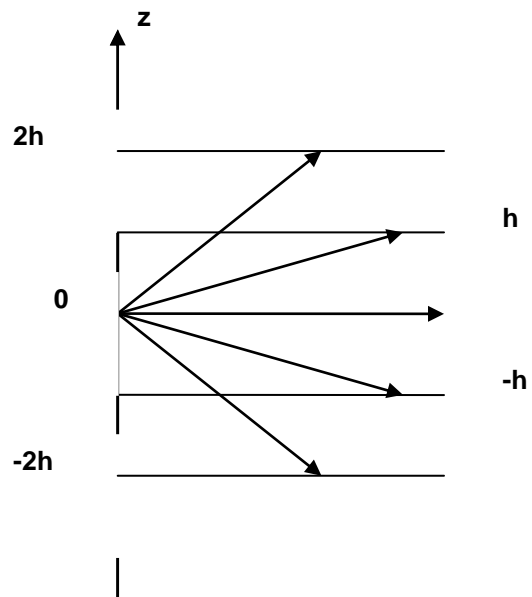
Загальний розв'язок для кутової частини хвильової ф-ції.

Р-ня на власні значення та власні ф-

ції оператора \hat{L}^2 має вигляд: $\hat{L}^2 Y(\theta, \varphi) = L^2 Y(\theta, \varphi)$ причому оператор

$$\hat{L}^2 \text{ виражається формулою } \hat{L}^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right\} \quad 3$$

нього впливає, що $L^2 = l(l+1)\hbar^2, l=0,1,2,\dots$ Число l називається



орбітальним квантовим числом. При заданому l магнітне квантове число m може набувати значень $m=0, \pm 1, \dots, \pm l$ усього $2l+1$ значень. Власні ф-ції $Y(\theta, \varphi)$ називаються сферичними ф-

ціями, які записуються так: $Y_{lm}(\theta, \varphi) = A_l^{|m|} P_l^{|m|}(\cos\theta) e^{im\varphi}$ де

$$A_l^{|m|} = \sqrt{\frac{(l-|m|)!(2l+1)}{(l+|m|)!4\pi}} \quad P_l^{|m|}(\cos\theta) = (1-\cos^2\theta)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{d(\cos\theta)^{|m|}} P_l(\cos\theta),$$

$P_l(\cos\theta) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d(\cos\theta)^l} (\cos^2\theta - 1)^l$ Ф-ція $P_l(\cos\theta)$ є поліномами і

називаються поліномами Лежандра, а поліноми $P_l^{|m|}(\cos\theta)$ - приєднаними поліномами Лежандра. Для прикладу наведемо

вигляд найпростіших сферичних ф-цій: $Y_{00}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$;

$$Y_{10}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta ; \quad Y_{1\pm 1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\varphi}$$

Вектор моменту імпульсу \vec{L} частинки в центральному полі має певне значення модуля $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar, l=0,1,2,\dots$ та проекції $L_z = m\hbar, m=0, \pm 1, \dots, \pm l$. Це

означає, що вектор \vec{L} може мати лише певні дискретні орієнтації відносно осі Z . Таке явище називається просторовим

квантуванням. Для випадку $l=2, L = \sqrt{6}\hbar, L_z = 0, \pm\hbar, \pm 2\hbar$ просторове квантування зображене на рис.

18 Р-ня для радіальної частини хвильової ф-ції. Випадки дискретного та неперервного спектрів.

Див. (Розчеплення хвильової ф-ції на радіальну та кутову частини.)

Причому згідно з $\hat{L}^2 Y(\theta, \varphi) = L^2 Y(\theta, \varphi)$; $L^2 = l(l+1)\hbar^2, l = 0, 1, 2, \dots$

$\Rightarrow \hat{L}^2 Y = l(l+1)\hbar^2 Y$ і поділивши після цього р-ня на добуток $R Y$

дістанемо: $\hat{T}_r R(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} R(r) + U(r)R(r) = ER(r)$ (20) – радіальне р-ня

Шредінгера. Якщо потенціальну енергію $U(r)$ задати у явному вигляді, то воно стане конкретним диференціальним р-ням,

розв'язавши яке знайдемо радіальну ф-цію $R(r)$ і спектр енергії

E . Підставивши потім знайдену ф-цію $R(r)$ у (19), дістанемо

хвильову ф-цію $\Psi(\vec{r})$. Розглянемо можливий характер

енергетичного спектра частинки в центральному полі. Ф-цію $R(r)$

запишемо у вигляді $R(r) = \frac{V(r)}{r}$ (21) після підстановки (21) до (20)

знайдемо

р-ня для ф-ції $V(r)$: $-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 V}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} V + U(r)V = EV$ (22) надалі будемо

вважати, що $U(r) = \frac{A}{r^\alpha}$, $\alpha < 2$. (23) Зокрема для електрона в атомі

гідрогену $\alpha = 1$. За великих значень r у лівій частині р-ня (22)

другим та третім доданками можна знехтувати, і тоді $\frac{d^2 V}{dr^2} = -\frac{2mEV}{\hbar^2}$

(24). Розв'язки цього р-ня залежать від знака енергії E :

$$V(r) = A_1 e^{ikr} + A_2 e^{-ikr}, k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, E > 0; \quad (25)$$

$$V(r) = A_1 e^{-\beta r} + A_2 e^{\beta r}, \beta = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}, E < 0. \quad (26) \text{ Відповідні радіальні ф-ції}$$

мають вигляд: $R(r) = \frac{A_1}{r} e^{ikr} + \frac{A_2}{r} e^{-ikr}, E > 0$ (27)

$$R(r) = \frac{A_1}{r} e^{-\beta r} + \frac{A_2}{r} e^{\beta r}, E < 0 \quad (28).$$

Розв'язок (27) є лінійною суперпозицією двох частинних розв'язків, які відповідають збіжним та розбіжним хвилям, що описують частинки, які рухаються з нескінченності до центра поля і навпаки. З погляду класичної механіки такі частинки рухаються по аперіодичних орбітах. У

розв'язку (28) $A_2 = 0$ інакше $R(\infty) = \infty$, тому $R(r) = \frac{A_1}{r} e^{-\beta r}, E < 0$

$$d\omega(r) = \int_{\Omega} |\Psi|^2 dV = \int_{\Omega} |R(r)Y(\theta, \varphi)|^2 r^2 dr d\Omega = |R(r)|^2 r^2 dr \int_{\Omega} |Y(\theta, \varphi)|^2 d\Omega = |A_1|^2 e^{-2\beta r} dr.$$

(29) Знак Ω біля інтеграла означає інтегрування за кутами θ, φ .

Використано також умову нормування сферичної ф-ції $Y(\theta, \varphi)$.

При $r \rightarrow \infty$ імовірність $d\omega(r)$ швидко прямує до нуля, тому розв'язок (29) описує частинку, що знаходиться біля центра поля, а з погляду класичної механіки рухається по періодичній орбіті. За

малих значень r у р-ні (22) слід зберегти перші два доданки:

$$\frac{d^2 V}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} V = 0$$

Розв'язок цього р-ня будемо шукати у вигляді

$$V(r) = r^\gamma, \text{ радiальна ф-ція цього р-ня має вигляд } R(r) = B_1 r^l + B_2 r^{-l-1}.$$

Умова скінченності ф-ції $R(r)$ при $r \rightarrow 0$ потребує, щоб $B_2 = 0$, тобто

слід залишити один частинний розв'язок $R(r) = B_1 r^l$ з однією сталою

інтегрування. Однак тоді в разі збільшення r указаний розв'язок має перейти в частинний розв'язок, який відповідає або (27) (при $E > 0$), або (28) (при $E < 0$). Це означає, що A_1, A_2 мають бути

взаємозалежними, тобто $\frac{A_1}{A_2} = f(E)$ при $E < 0$ маємо $A_2 = 0$, тому

$f(E) = 0$. Корені цього р-ня $E_1, E_2, \dots, E_n, \dots$ утворюють дискретний

спектр, тому при $E < 0$ спектр енергії частинки в центральному полі

дискретний. При $E > 0$ коефіцієнти A_1, A_2 можуть мати довільні значення.

Отже, ф-ція $f(E)$ теж може мати довільні значення. З цього випливає, що при $E > 0$ спектр енергії частинки – неперервний.

19 Рух частинок в кулонівському потенціальному полі.

У випадку центрального кулонівського поля отримуємо р-ня для

радіальної частини
$$\frac{d^2X}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} X + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + \frac{ze^2}{r} \right] X = 0 \quad \rho = \frac{r}{a},$$

$$a = \frac{\hbar^2}{mE}, \quad \varepsilon = \frac{E}{E_1}, \quad E = \frac{me^4}{r\hbar^2} = \frac{e^2}{2a}$$
 проведемо заміну для E:

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

р-ня:
$$\frac{1}{a^2} \frac{d^2X}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{a^2 \rho^2} X + \varepsilon X + \frac{2z}{\rho} X = 0$$
 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

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

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

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

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

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

вигляді ряду:
$$f(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k, \quad \frac{d}{d\rho} = \sum_{k=0}^{\infty} k a_k \rho^{k-1}, \quad \frac{d^2}{d\rho^2} = \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) a_k \rho^{k-2},$$

підставимо у р-ня:

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

заміна $k = m + 1$ $\sum_{m=0}^{\infty} (m+1) m a_{m+1} \rho^m + 2(l+1) \sum_{m=0}^{\infty} (m+1) a_{m+1} \rho^m -$

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

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

коефіцієнти = 0, тобто отримуємо рекурентне співвідношення:

$a_{k+1} = \frac{2\alpha \left[k + l + 1 - \frac{z}{\alpha} \right]}{k(k+1) + 2(k+1)(l+1)} a_k$ коли $\rho \rightarrow \infty \Rightarrow f(\rho) \sim \exp(2\alpha\rho)$ 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 $k = n_r$ ряд обривається (хоча б

один з $a_k = 0$) знайдемо n_r : $n \equiv n_r + l + 1 = \frac{z}{\alpha} = \frac{z}{\sqrt{-\epsilon}}$, де n – головне

квантове число. $\epsilon = -\frac{z^2}{n^2}$ $E = -\frac{z^2 m e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$ - спектр воднево подібних

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

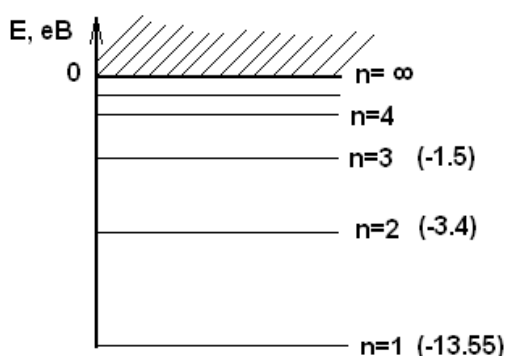
узагальнений поліном Лягера.

$R_{10}(r) = 2 \left(\frac{z}{a}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{zr}{a}\right)$, $R_{20}(r) = \left(\frac{z}{2a}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{2r}{a}\right) \exp\left(-\frac{zr}{2a}\right)$ Підсумок:

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

20 Теорія атома водню та воднево подібних атомів.

Випадки дискретного та неперервного спектрів



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

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

в електрон-вольтах

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

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 $0..n-1$, а при заданому l магнітне квантове число m має $2l+1$ значень. Отже

кратність виродження рівня енергії E_n становить: $f = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$ (31).

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

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

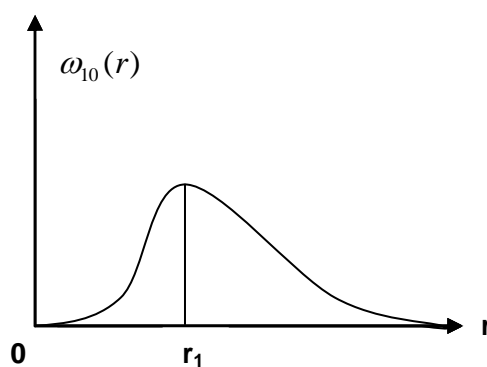
$$\omega_{00}(\theta) = |Y_{00}(\theta, \varphi)|^2 = \frac{1}{4\pi} = \text{const}$$

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:

$$\omega_{10}(r) = R_{10}^2(r)r^2 = \frac{4}{r_1^3} \exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right)r^2 \quad (34) \text{ графік якого зображено на мал.}$$

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.

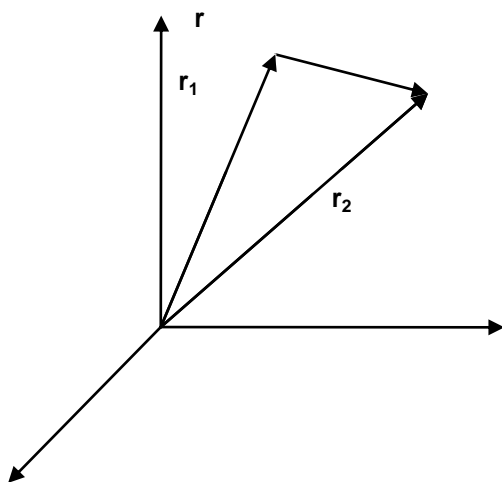
Подібним способом можна довести, що при $n=2$ найімовірніша відстань $=4r_1$, при $n=3$ вона становить $9r_1$. Стан Ψ_{200} теж



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, визначеним 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 $n^l(2l+1)$ - кратно вироджені за магнітним квантовим числом m .

Задача двох тіл у квантовій механіці:

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

перейдемо від \vec{r}_1, \vec{r}_2

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

$$\psi = \varphi(\vec{R})\psi(\vec{r}), \quad \psi(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \Delta_{\vec{R}} \varphi(\vec{R}) \right) - \varphi(\vec{R}) \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}} \psi(\vec{r}) = E \varphi \psi \quad \left| \frac{1}{\varphi \psi} \right.$$

$$-\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \Delta_{\vec{R}} \varphi = \alpha \varphi(\vec{R}), \quad \text{де} \quad \alpha = \frac{\hbar^2 p^2}{2(m_1 + m_2)}, \quad \varphi = \exp\left(\frac{\vec{p} \vec{r}}{\hbar}\right)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}} \psi(\vec{r}) + U(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = (E - \alpha) \psi(\vec{r})$$

Випадки дискретного та неперервного спектрів

§ 38. Движение в кулоновском поле. Дискретный спектр

Исследуем движение электрона в кулоновском поле с потенциальной энергией

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r}. \quad (38,1)$$

Стационарные состояния движения электрона в кулоновском поле для радиальной волновой функции $R(r) = rf(r)$

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \left[\frac{2\mu E}{\hbar^2} + \frac{2\mu Ze^2}{\hbar^2 r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0. \quad (38,2)$$

$$a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \approx 5,292 \cdot 10^{-9} \text{ см}, \quad (38,3)$$

и атомную единицу энергии

$$E_a = \frac{e^2}{a} = \frac{\mu e^4}{\hbar^2} \approx 27,21 \text{ эВ}. \quad (38,4)$$

Переходя к безразмерным величинам

$$\rho = \frac{r}{a}, \quad \varepsilon = \frac{E}{E_a}, \quad (38,5)$$

преобразуем уравнение (38,2) к виду

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + 2\varepsilon + \frac{2Z}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R(\rho) = 0. \quad (38,6)$$

$$\alpha^2 = -2\varepsilon > 0. \quad (38,7)$$

Тогда уравнение (38,6) принимает вид

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \alpha^2 + \frac{2Z}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R(\rho) = 0. \quad (38,8)$$

Исследуем решение уравнения (38,8) для больших значений ρ .

$$R(\rho) = Ae^{-\alpha\rho} + Be^{\alpha\rho}, \quad \rho \rightarrow \infty.$$

$$R(\rho) = e^{-\alpha\rho} F(\rho), \quad (38,9)$$

где функцию $F(\rho)$ представим в виде степенного ряда

$$F(\rho) = \rho^\gamma \sum_{\nu=0}^{n_r} \beta_\nu \rho^\nu. \quad (38,10)$$

Для определения асимптотического поведения $F(\rho)$ при малых ρ подставим (38,9) в уравнение (38,8), сохраняя члены с наименьшими степенями ρ . Тогда получим уравнение, определяющее γ ,

$$\gamma(\gamma - 1) = l(l + 1),$$

из которого следует

$$\gamma = \begin{cases} l + 1, \\ -l. \end{cases}$$

Чтобы $R(\rho)$ стремилось к нулю при $\rho \rightarrow 0$, надо взять только одно решение $\gamma = l + 1$.

Итак, решение, удовлетворяющее граничным условиям в нуле и в бесконечности, можно искать в виде

$$R(\rho) = e^{-\alpha\rho} \rho^{l+1} \sum_{\nu=0}^{n_r} \beta_{\nu} \rho^{\nu}. \quad (38,11)$$

$$\beta_{\nu+1} = \frac{2[\alpha(\nu+l+1) - Z]}{(\nu+l+2)(\nu+l+1) - l(l+1)} \beta_{\nu}, \quad (38,12)$$

позволяющее выразить последовательно все коэффициенты степенного ряда (38,10) через значение β_0 , которое определится из условия нормировки функции. Условие, чтобы степенной ряд (38,10) обрывался*) на члене с $\nu = n_r$, согласно (38,12), сводится к требованию

$$\alpha(n_r + l + 1) = Z. \quad (38,13)$$

Вспоминая определение (38,7), находим значение энергии в атомных единицах

$$\varepsilon = -\frac{\alpha^2}{2} = -\frac{Z^2}{2(n_r + l + 1)^2}. \quad (38,14)$$

Величина $n = n_r + l + 1$ называется *главным квантовым числом*, так как она определяет значение энергии стационарных состояний

$$\varepsilon = -\frac{Z^2}{2n^2}. \quad (38,15)$$

общая кратность вырождения стационарного состояния с квантовым числом n будет равна

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2.$$

В общем случае для произвольного состояния нормированная радиальная волновая функция выражается через вырожденную гипергеометрическую функцию формулой

$$f_{nl}(\rho) = N_{nl} \left(\frac{2Z\rho}{n}\right)^l F\left(-n+l+1, 2l+2, \frac{2Z\rho}{n}\right) e^{-\frac{Z\rho}{n}},$$

где

$$N_{nl} = \frac{1}{(2l+1)!} \left[\frac{(n+l)!}{2n(n-l-1)!} \right]^{1/2} \left(\frac{2Z}{n}\right)^{3/2}.$$

Квантовое число

$$n_r = n - l - 1$$

определяет число узлов волновой функции, т. е. число пересечений этой функцией оси ρ (исключая значение $\rho = 0$).

§ 39. Движение в кулоновском поле. Непрерывный спектр

Перейдем к исследованию стационарных состояний движения электрона в кулоновском поле (38,1) при положительной энергии

$$k^2 = 2\varepsilon \geq 0, \quad (39,1)$$

тогда уравнение (38,6) для функции $R(\rho)$ примет вид

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + k^2 + \frac{2Z}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R(\rho) = 0. \quad (39,2)$$

Асимптотическое значение при $\rho \rightarrow \infty$ функции

$$R(\rho) \sim Ae^{ik\rho} + Be^{-ik\rho}$$

Таким образом, решение (39,2) можно искать в виде

$$R(\rho) = e^{\pm ik\rho} \rho^{l+1} \sum_{v=0}^{\infty} \beta_v \rho^v. \quad (39,3)$$

Подставляя (39,3) в (39,2) и приравнявая нулю коэффициенты, стоящие при одинаковых степенях ρ , находим рекуррентное соотношение

$$\beta_{v+1} = \frac{2[i(v+l+1)k - Z]}{(v+l+2)(v+l+1) - l(l+1)} \beta_v. \quad (39,4)$$

Следовательно, ряд (39,3) всегда сходится. Преобразуем (39,4) к виду

$$\beta_{v+1} = \frac{2ik \left[v+l+1 - \frac{Z}{ik} \right]}{(v+1)(v+2l+2)} \beta_v,$$

тогда, подставляя это значение в (39,3), можно выразить функцию $R(\rho)$ через вырожденную гипергеометрическую функцию

$$R_{kl}(\rho) = e^{\pm ik\rho} \rho^{l+1} F \left(l+1 \pm \frac{Z}{ik}, 2l+2, \mp 2ik\rho \right). \quad (39,5)$$

Полученные результаты легко обобщить на случай движения позитрона в поле ядра,

$$U = \frac{Ze^2}{r}.$$

В этом случае полная энергия частицы может быть только положительной. Стационарные состояния движения с определенной энергией $\varepsilon = \frac{1}{2} k^2$ (в атомных единицах) и определенным орбитальным моментом выражаются линейной комбинацией волновых функций, радиальные части которых выражаются формулой

$$R_{kl}(\rho) = e^{\pm ik\rho} \rho^{l+1} \mathbf{F}\left(l+1 \mp \frac{Z}{ik}, 2l+2, \mp 2ik\rho\right), \quad (39,6)$$

которая получается из (39,5) изменением знака у Z . Радиальные функции (39,6) можно использовать и для описания движения протона с энергией E и определенным орбитальным моментом l в поле ядра, если положить

$$\rho = r \frac{Me^2}{\hbar^2}, \quad k = \frac{\hbar}{e^2} \sqrt{\frac{2E}{M}}, \quad \text{где } M \text{ — масса протона.}$$

21 Випадки дискретного та неперервного спектрів. Відсутнє Квантові числа та їх фізичний зміст.

Если брать полуклассическую-полуквантовую теорию Бора-Зоммерфельда, то квантовые числа берутся из соотношения

$\oint p_i dq_i = n_i h$, где q_i и p_i – обобщенные координаты и им-пульсы ($p_i = \partial T / \partial \dot{q}_i$, где T -кинетическая энергия системы) Для

трехмерного пространства получаем три числа n , n_φ (определяют малую и большую полуоси эллипса), m (определяет проекцию момента) В квантовой механике решается уравнение Шредингера

для системы атом-электрон $\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta - \frac{Ze^2}{r} \right) \Psi = E\Psi$ (*) (Методом

разделения переменных находим решение в виде

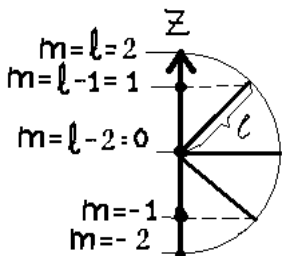
$\Psi = R_{nl}(\rho)\Theta_{ml}(\theta)\Phi_m(\varphi)$ которое зависит от трех чисел n, m, l .

Уравнения для нахождения собственного значения оператора момента импульса ($\hat{L}^2\Psi = L^2\Psi$) и уравнение Шредингера (*) для угловой части ($\Delta_{\theta\varphi}(\Theta_{ml}\Phi_m(\varphi)) + l(l+1)(\Theta_{ml}\Phi_m(\varphi)) = 0$) тождественны, если

$L^2 = \hbar^2 l(l+1)$. Т.е. орбитальное число l определяет квадрат момента импульса движения электрона. Аналогично для уравнения

проекции момента импульса ($\hat{L}_z\Psi = L_z\Psi$) получаем $\hbar m = L_z$, где m (как проекция l на ось Z) принимает значения

$l, (l-1), \dots, 0, -1, -2 \dots -l$ (См.рис.)



Решение уравнения (*) для радиальной части $R_{nl}(\rho)$ будет конечной функцией, если

выполняется условие $E = -\frac{Z^2 e^4 m}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} * \frac{1}{(n_r + l + 1)^2}$, т.е.

главное квантовое число $n = n_r + l + 1$ определяет энергию стационарного состояния. Из этого соотношения видно,

что l принимает значения от 0 до $n-1$ Четвертое квантовое число m_s (определяет ориентацию спина электрона, принимает значение $-1/2, +1/2$) из простого уравнения Шредингера не получить, надо использовать уравнения квантовой электродинамики.

22 Виродження енергетичних рівнів.

Если собственному значению L_n оператора \hat{L} принадлежит не одна собственная функция φ_n а $f > 1$ функций $\phi_{n1}, \phi_{n2}, \dots, \phi_{nf}$ то говорят о f –кратном вырождение. Физический смысл вырождения заключается в том, что какое-нибудь определенное значение L_n величины L может реализовываться в разных состояниях. Например уровни энергий водородоподобных атомов с зарядом ядра Ze и одним электроном n -кратно вырождены.

Одному значению энергии $E_n = -Z^2 \frac{e^4 m_0}{2\hbar^2 n^2}$ соответствует

n эллиптических орбит (n -кратное вырождение). Эти орбиты отличаются одна от другой величиной малой полуоси. (Для $n=1$ вырождения нет – орбита круговая). Т.е в поле $\sim 1/r^2$ эллиптические орбиты с одинаковой большой полуосью, но разными малыми будут обладать одной и той же энергией. В другом поле (напримаер при экранирование поля ядра другим электроном или если приложить внешнее поле) энергия уже будет зависеть от значения малой полуоси. Также вырождение можно снять с помощью магнитного поля., т.к.у орбиты с разными полуосями будут обладать разным магнитным моментом, а значит будет и разная энергия взаимодействия с магнитным полем. **Виділення руху центра мас системи та врахування руху ядра в атомах.**

Уравнение Шредингера для системы атом-электрон(с учетом конечности массы ядра) имеет вид

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} \right) \right] (*) \Psi + U(r)\Psi = E\Psi,$$

где m_1 –масса ядра, x_1, y_1, z_1 -его координаты, m_2 -масса электрона, x_2, y_2, z_2 -его координаты, r -расстояние мажду ядром и

эл.-ом. Вводя обозначения $X = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2}$, $Y = \frac{m_1 y_1 + m_2 y_2}{m_1 + m_2}$, $Z = \frac{m_1 z_1 + m_2 z_2}{m_1 + m_2}$;

$x = x_1 - x_2$, $y = y_1 - y_2$, $z = z_1 - z_2$ (X, Y, Z –координаты центра масс x, y, z -

просто относительные координаты) $M = m_1 + m_2$, $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$, тогда ур-

ие (*) принимает

$$\text{вид } -\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial Z^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right) + U(r)\Psi = E\Psi$$

В решении

этого уравнения можно разделить переменные и тогда оно примет

$$\text{вид } \Psi(X, Y, Z, x, y, z) = e^{-\frac{i}{\hbar}(p_x X + p_y Y + p_z Z)} \psi(x, y, z)$$

Это решени

означает свободное движение центра тяжести атома с импульсом

p_x, p_y, p_z для функции $\psi(x, y, z)$, описывающей относительное

$$\text{движение, получаем } -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + U(r)\psi = \varepsilon\psi \quad (**)$$

, где

$$\varepsilon = E - \frac{p^2}{2M}$$

уравнение(**) совпадает с уравнением движения

частицы массой μ в силовом поле $U(r)$, ε имеет смысл внутренней энергии атома, полная энергия

$$E = \varepsilon + \frac{p^2}{2M}$$

складывается из энергии относительного движения ε и

энергии движения центра тяжести атома $\frac{p^2}{2M}$. Т.к. (***) совпадает с уравнением движения электрона где не учитывалась масса ядра, то во всех полученных формулах просто следует поставить вместо массы электрона приведенную массу μ (т.к. масса ядра \gg массы электрона, то $\mu \approx m$). В частности постоянная Ридберга R для разных атомов имеет разное значение. Так точным измерением спектральных линий можно определить массу изотопа и массу самого электрона.

23 Струм в атомах та магнітний орбитальний момент атома.

Подействуем оператором плотности тока

$$\vec{j} = -\frac{i e \hbar}{2M} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \quad \text{на функцию } \Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$$

$= R_{nl}(r) \Theta_{ml}(\theta) \Phi_m(\varphi)$, которая является решением для электрона

в атоме. В сферических координатах оператор $\nabla = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} +$

$$\vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

тогда соответствующие составляющие

\vec{j} равны

$$\vec{j}_r = -\frac{i e \hbar}{2M} (\Psi \frac{\partial}{\partial r} \Psi^* - \Psi^* \frac{\partial}{\partial r} \Psi) = 0 \quad (\vec{j}_r \parallel \vec{e}_r) \quad \text{и} \quad \vec{j}_\theta = -\frac{i e \hbar}{2Mr} (\Psi \frac{\partial}{\partial \theta} \Psi^* - \Psi^* \frac{\partial}{\partial \theta} \Psi) = 0,$$

$(\vec{j}_\theta \parallel \vec{e}_\theta)$ т.к. $R_{nl}(r)$ и $\Theta_{ml}(\theta)$ действительные функции.

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\varphi) \quad \text{-комплексная, тогда}$$

$$\vec{j}_\varphi = -\frac{i e \hbar}{2Mr} (\Psi (-im) \Psi^* - \Psi^* im \Psi) = -\frac{e \hbar}{Mr \sin \theta} m |\Psi|^2 \quad (\vec{j}_\varphi \parallel \vec{e}_\varphi), \text{ т.е. нет стока и}$$

вытока заряда, ток циркулирует по кругу (переменная φ) Найдем магнитный момент, который образует этот ток

$$dJ = j_\varphi d\sigma; \quad dM_Z = \frac{d(IS)}{c} = \frac{j_\varphi d(\sigma S)}{c}$$

$$= -\frac{e \hbar m |\Psi|^2}{Mrc \sin \theta} (r^2 \sin^2 \theta \pi) d\sigma \quad \text{Интегрирование по всем углам дает}$$

$$\vec{M}_Z = -\frac{e \hbar m}{2Mc} \left| \frac{M_Z}{L_Z} \right| = -\frac{e}{2Mc} \quad \text{По классической физике } M = \frac{JS}{T} =$$

$$-\frac{eV(\pi r^2)}{2\pi c} = -\frac{eVr}{2c} \quad L = mVr \quad \left| \frac{M}{L} \right| = -\frac{e}{2Mc}$$

Гіромагнітне відношення.

Гиромангнитное отношение-отношение магнитного момента к механическому Для движения электрона по атомной орбите

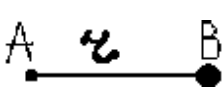
$$\left| \frac{M}{L} \right| = -\frac{e}{2Mc} \quad (\text{вывод в классической и квантовой теории см. билет}$$

«струм в атомах та магнітний орбітальний момент») Кроме этого электрон сам по-себе обладает магнитным и механическим моментом-спином .Если рассматривать это как следствие вращения эл.-на вокруг своей оси(вращающаяся заряженная сфера), то расчет для такой модели поясняет аномальное гиромангнитное отношение,но дает скорость вращения точек поверхности больше скорости света , т.е. спин нельзя рассматривать как следствие каго-нибудь движения, он является неотъемлемой характеристикой изначально присущей и не к чему не сводимой(как масса или заряд). Различные эксперименты показали, что для электрона

$$\left| \frac{M}{L} \right| = -\frac{e}{Mc} \quad , \text{ то есть в два раза больше.}$$

Это называется аномальным гиромангнитным отношением. Еще одна аналогия для представления о спине (вроде вращения сферы) если электрон рассматривать как волну, то спин можно интерпретировать как поляризацию этой волны(у спина 2 проекции и поляризация бывает правая и левая)

24. Коливальний та обертальний рух в двоатомній молекулі.


 $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_A} + \frac{1}{m_B}$ перейдемо до розгляду руху центра мас. Візьмемо гамильтониан у вигляді

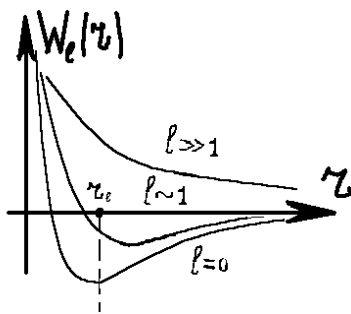
$$\hat{H} = \hat{T}_r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + U(r) \quad \left(\text{где } \hat{T}_r = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \right) \right)$$

введемо нову функцію $R(r) = \frac{\chi(r)}{r}$, тоді рівняння Шредингера прийме вигляд

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 \chi}{dr^2} + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + U(r) \right) \chi(r) = E(r)$$

тепер сумарна потенціальна енергія

молекули $W_l(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + U(r)$ (її графік см. рис.)



знайдемо мінімум цієї енергії

$$\frac{dW_l}{dr} = -\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^3} + \frac{U(r)}{r} = 0$$

введемо заміну $\eta = r - r_l$ і розкладемо в ряд цю енергію біля цього мінімуму з точністю до гармонічного слагаемого

$$W_l(r) = W_l(r_l) + \frac{1}{2} \frac{d^2 W_l(r_l)}{dr^2} \eta^2 + \dots \quad \text{или} \quad W_l(r) = W_l(r_l) + \frac{\mu \omega_l^2 \eta^2}{2}$$

підставляємо і отримуємо рівняння Шред. Для гармонічного осцилятора

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 \chi}{dr^2} + \frac{1}{2} \mu \omega_l^2 \eta^2 \chi = (E - W_l(r_l)) \chi - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \chi$$

для якого рівні

енергії $E_n^l = \hbar \omega_l \left(n + \frac{1}{2} \right)$ і рішення $\chi_n(r) = C_n \exp\left(-\frac{\zeta^2}{2}\right) H_n(\zeta)$, где $\zeta = \frac{\eta}{\eta_l}$

$$\eta_l = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu \omega_l}}$$

Енергія молекули складається з 3-х

слагаемых $E_n = U_l(r) + \hbar \omega_l \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r_l^2}$, где 2-ое слагаемое – енергія коливальна, 3-ье енергія вращательна по правилам квантовой механики

енергія осцилятора може змінюватися на $\Delta E_l = \frac{\hbar^2}{J} (l+1)$ (где J-момент інерції)

25 Хвильова функція с-ми в довільному представленні.

Величини КМ (квантової механіки) не можуть бути визначені точно – цьому заважає співвідношення невизначеностей. Виразити оператори і їхні хвильові функції через координати (координатне представлення) зручно тільки тоді, коли нас цікавлять координатні характеристики, інші характеристики (наприклад імпульсні) в цьому випадку можуть бути визначені тільки з певною похибкою. Якщо ми візьмемо іншу величину як базову, то вона стане основою нового представлення і дасть нам змогу визначити потрібні характеристики с-ми (імпульсні, енергетичні і.т.п.) точно. Для того, щоб перейти від представлення А до представлення В слід:

1) Знайти власні ф-ції оператора \hat{B} в представленні А :

$\hat{B} \psi_b(a) = B_b \psi_b(a)$. Наприклад: $x \longrightarrow p$, тоді маємо для власних ф-

цій оператора \hat{p} : $\hat{p} \psi_p(x) = p_p \psi_p(x)$, де ψ_p і p_p - відповідно власні ф-ції і власні значення оператора імпульсу в координатному представленні.

2) Розкласти хвильову ф-цію, яку необхідно представити в В, по

власним ф-ціям, знайденим в першому пункті: $\psi(x) = \sum_b C_b \psi_b(x)$ -

для випадку дискретних C_b або $\psi(x) = \int C_b \psi_b(x) db$ - для неперервних C_b . Для нашого прикладу маємо: а) Випадок дискретних власних

значень: $\psi(x) = \sum_p C_p \psi_p(x)$. $|C_p|^2$ - імовірність того, що імпульс

приймає значення p_p . $\int |\psi(x)|^2 dx = \sum_p |C_p|^2 = 1$ - імовірність того, що

імпульс приймає довільне значення. б) Випадок неперервних

власних значень: $\psi(x) = \int C_p \psi_p(x) dp$.

$$\int |\psi(x)|^2 dx = \int |C_p|^2 dp = \int \psi(x) \psi^*(x) dx = \int \left(\int C_p \psi_p(x) dp \int C_{p'}^* \psi_{p'}^*(x) dp' \right) dx =$$

$$= \iint C_{p'}^* C_p \left(\int \psi_{p'}^*(x) \psi_p(x) dx \right) dp' dp = \int |C_p|^2 dp = 1 \cdot \int |\psi(x)|^2 dx$$

імовірність того, що частинка в інтервалі dx . $|c_p|^2$ - імовірність того, що імпульс частинки знаходиться в інтервалі dp .

3) набір коефіцієнтів C_b (цей набір може бути як дискретним, так і неперервним) – це і є хвильова ф-ція в новому представленні. В нашому прикладі набір C_p - це хвильова функція в імпульсному представленні.

26 Оператор фізичної величини в довільному представленні.

Величини КМ (квантової механіки) не можуть бути визначені точно – цьому заважає співвідношення невизначеностей. Виразити оператори і їхні хвильові функції через координати (координатне представлення) зручно тільки тоді, коли нас цікавлять координатні характеристики, інші характеристики (наприклад імпульсні) в цьому випадку можуть бути визначені тільки з певною похибкою. Якщо ми візьмемо іншу величину як базову, то вона стане основою нового представлення і дасть нам змогу визначити потрібні характеристики с-ми (імпульсні, енергетичні і.т.п.) точно. Перед нами стоїть задача знаючи оператор в деякому представленні А знайти цей оператор в представленні В. Покладемо для зручності, що $A = x$. Отже нам задано деякий оператор в координатному представленні $\hat{L}(x)$. Цей оператор ставить у відповідність деякій ф-

ції $\psi(x)$ іншу ф-цію $\varphi(x)$: $\hat{L}(x)\psi(x) = \varphi(x)$ (1). Звідси слідує, що для того, щоб знайти наш оператор в іншому представленні спочатку потрібно перетворити хвильові функції. Отже маємо таку послідовність дій при переході від X до B представлення : 1)

Знаходимо власні ф-ції оператора \hat{B} в X представленні:

$\hat{B}(x)\psi_n(x) = B_n\psi_n(x)$. 2) Розкладаємо по знайденим власним ф-ціям

ψ і φ : $\psi(x) = \sum_n C_n\psi_n(x)$, $\varphi(x) = \sum_n b_n\psi_n(x)$. 3) Підставляємо

розкладені ф-ції до (1): $\hat{L}(x)\sum_n C_n\psi_n(x) = \sum_n b_n\psi_n(x)$,

$\sum_n C_n\hat{L}(x)\psi_n(x) = \sum_n b_n\psi_n(x)$ (2). Помножимо (2) на ψ_m^* і проінтегруємо

по всьому простору, враховуючи при цьому ортогональність власних ф-цій. Отримаємо:

$$\sum_n C_n \int \psi_m^*(x) \hat{L}(x) \psi_n(x) dx = \sum_n b_n \int \psi_m^* \psi_n dx = b_m \quad \sum_n L_{mn} C_n = b_m \quad (3),$$

де $L_{mn} = \int \psi_m^* \hat{L}(x) \psi_n dx$ - матричний елемент оператора \hat{L} . Якщо порівняти (3) і (1), то видно, що вони мають однакову структуру і

набір матричних елементів відіграє роль оператора. Отже, в довільному представленні оператор зображується у вигляді матриці. Аналогом до ф-ли (3), але в інтегральному виді є така ф-ла: $\int L_{mn} C_n dn = b_m$ (4). Приклад: Знайдемо оператор координати в імпульсному представленні. Запишемо оператори координат і імпульсу в координатному представленні:

$$\hat{x} = x, \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} .$$

Спочатку знайдемо оператор імпульсу в

імпульсному представленні: 1) Знаходимо власні ф-ції \hat{p} в координатному представленні:

$$\hat{p}\psi_p = p\psi_p \Rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_p(x) = p\psi_p(x) \Rightarrow \psi_p = C \exp(i \frac{px}{\hbar}) .$$

Константу C

знаходимо з умови нормування: $\int \psi_{p'}^* \psi_p dx = \delta(p' - p) \Rightarrow C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} .$ 2)

Знаходимо оператор імпульсу в шуканому представленні як сукупність матричних елементів:

$$\hat{p} = p_{p'p} = \int \psi_{p'}^*(x) \hat{p} \psi_p(x) dx = p \int \psi_{p'}^* \psi_p dx = p \delta(p - p') .$$

Отже, оператор

імпульсу у власному представленні зображується нескінченною діагональною матрицею і дорівнює самому імпульсу, який може приймати будь-яких значень. Отриманий результат можна узагальнити: У власному представленні оператор будь-якої фізичної величини зображується у вигляді діагональної матриці.

Знайдемо тепер оператор координати:

$$\hat{x} = x_{p'p} = \int \psi_{p'}^* x \psi_p dx = \int \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i \frac{p'x}{\hbar}} x \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i \frac{px}{\hbar}} dx =$$

$$= \int \frac{-i\hbar}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i \frac{p'x}{\hbar}} \frac{\partial}{\partial p} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i \frac{px}{\hbar}} dx = -i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \int \psi_{p'}^* \psi_p dx .$$

Отже,

$$\hat{x} \rightarrow x_{p'p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \delta(p' - p) .$$

Для інтегрального вигляду отримуємо:

$$(4) \Rightarrow \int L_{pp'} C_{p'} dp' = b_p \Rightarrow -i\hbar \int \frac{\partial}{\partial p} \delta(p' - p) C_{p'} dp' =$$

$$= -i\hbar \left\{ -C_{p'} \delta(p' - p) \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int \delta(p' - p) \frac{\partial C_{p'}}{\partial p} dp' \right\} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} C_p = b_p.$$

Перший доданок в фігурних дужках дорівнює нулю в силу того, що $C_{p'} \rightarrow 0$ при $p' \rightarrow \pm\infty$, так як вірогідність того, що імпульс буде приймати нескінченні значення дорівнює нулю.

$\hat{x}(p)C_p = b_p \Rightarrow \hat{x}_p = i\hbar \frac{\partial}{\partial p}$. Оператор виявився диференціальним, неперервним, може приймати будь-які значення.

27 Середнє значення фізичної величини в довільному представленні.

Якщо в нас є деяка фізична величина, якій відповідає деякий

оператор \hat{L} в координатному представленні, то середнє значення

цієї величини обчислюється за ф-лою :
$$\bar{L} = \int \psi^*(x) \hat{L}(x) \psi(x) dx$$

(1), де $\psi(x)$ - хвильова ф-ція с-ми. Тепер, якщо ми хочемо перейти від координатного представлення до іншого представлення А нам необхідно: 1) Знайти власні ф-ції оператора фізичної величини, в представленні якої ми шукаємо середнє значення (простіше кажучи нам потрібно знайти власні ф-ції

оператора \hat{A}) : $\hat{A}(x)\psi_n(x) = A_n\psi_n(x)$. 2) Потім розкладаємо

хвильову ф-цію с-ми $\psi(x)$ за власними ф-ціями знайденими в

попередньому пункті :
$$\psi(x) = \sum_n C_n \psi_n(x)$$
 - для . 3)

Підставляємо розкладену хвильову ф-цію с-ми в (1) і отримаємо:

$$\bar{L} = \sum_n \sum_m C_n^* \left(\int \psi_n^* \hat{L}(x) \psi_m dx \right) C_m = \sum_n \sum_m C_n^* L_{nm} C_m \quad (2), \text{ де}$$

$$L_{nm} = \int \psi_n^* \hat{L}(x) \psi_m dx \quad - \text{матричний елемент оператора } \hat{L} .$$

В інтегральному вигляді ф-ла (2) матиме вигляд:

$$\hat{L} = \iint C_{p'}^* L_{p'p} C_p dp dp'$$

28 Знаходження власних ф-цій довільного оператора в довільному матричному представленні.

Хай ми маємо в координатному представленні деякий оператор

\hat{L} і набір його власних ф-цій ψ_α : $\hat{L}\psi_\alpha = L_\alpha\psi_\alpha$ (1). Тепер ми хочемо знайти власні ф-ції цього оператора в іншому довільному представленні $A (x \rightarrow A)$. Для того, щоб це зробити виконаємо наступне: 1) Знайдемо власні ф-ції $\psi_n(x)$ оператора \hat{A} :

$\hat{A}(x)\psi_n(x) = A_n\psi_n(x)$. 2) Розкладаємо власні ф-ції оператора \hat{L} за

власними ф-ціями оператора \hat{A} : $\psi_\alpha = \sum_n C_n\psi_n(x)$ і

підставляємо їх до (1) : $\hat{L}(x)\sum_n C_n\psi_n(x) = L_\alpha\sum_n C_n\psi_n(x)$.

Помножимо отримане р-ння на $\psi_m^*(x)$ і проінтегруємо по

усьому простору: $\sum_n C_n \int \psi_m^*(x)\hat{L}(x)\psi_n(x)dx = L_\alpha C_m$ (2), вираз

під інтегралом – це матричний елемент L_{mn} оператора \hat{L} , що дає

нам змогу переписати (2) у вигляді: $\sum_n C_n L_{mn} = L_\alpha C_m$

(3) $\Rightarrow \begin{cases} m=1: C_1(L_{11} - L_\alpha) + C_2L_{12} + \dots + C_fL_{1f} = 0 \\ m=2: C_1L_{21} + C_2(L_{22} - L_\alpha) + \dots + C_fL_{2f} = 0 \\ \dots \\ m=f: C_1L_{f1} + C_2L_{f2} + \dots + C_f(L_{ff} - L_\alpha) = 0 \end{cases}$ Тут f – це максимально

можлива кількість власних ф-цій. Отже, ми отримали s -му лінійних алгебраїчних рівнянь (СЛАР). Щоб вона мала нетривіальні розв'язки необхідно, щоб її дискримінант

дорівнював нулю. Отже

$$\Delta = \begin{vmatrix} L_{11} - L_\alpha & L_{12} & \dots & L_{1f} \\ L_{21} & L_{22} - L_\alpha & \dots & L_{2f} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ L_{f1} & L_{f2} & \dots & L_{ff} - L_\alpha \end{vmatrix} = 0$$

Розкривши визначник ми отримаємо рівняння f – ого порядку

відносно L_α :

$$L_\alpha^f + A_1 L_\alpha^{f-1} + \dots + A_f = 0 \Rightarrow L_\alpha^{(1)}, L_\alpha^{(2)}, \dots, L_\alpha^{(f)}$$

- розв'язки р-

ння, які являють собою власні значення оператора \hat{L} в координатному представленні. Підставляємо знайдені розв'язки в

с-му (3) і знаходимо набір коефіцієнтів $\{C_n\}$, що відповідають

кожному власному значенню: $\{C_n^{(1)}\}, \{C_n^{(2)}\}, \dots, \{C_n^{(f)}\}$. Кожний

такий набір коефіцієнтів і являтиме собою одну з власних хвильових ф-ції оператора в представленні А. Отже кожній власній

ф-ції $\psi_\alpha^{(1)}$ в координатному представленні відповідає цілий

набір коефіцієнтів $\{C_n^{(1)}\}$, які і являють собою власну ф-цію

оператора \hat{L} в А представленні.

29 Рівняння Шредінгера у власній формі і у власному енергетичному представленні.

Нестационарне р-ння Шредінгера має вигляд:

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

. Нехай нам потрібно перейти до

представлення А. Для цього знайдемо власні ф-ції оператора \hat{A} :

$$\hat{A} \psi_n(x) = A_n \psi_n(x)$$

і розкладемо за ними хвильову ф-цію:

$$\psi(x) = \sum_n b_n \psi_n(x)$$

. Підставимо розкладену хвильову ф-цію до р-

ння Шредінгера: $i\hbar \sum_n \frac{\partial b_n}{\partial t} \psi_n(x) = \hat{H}(x) \sum_n b_n \psi_n(x)$. Помножимо

на $\psi_m^*(x)$ і проінтегруємо:

$$i\hbar \sum_n \frac{\partial b_n}{\partial t} \int \psi_m^* \psi_n dx = \sum_n b_n \int \psi_m^* \hat{H} \psi_n dx$$

. Позначивши

$$H_{mn} = \int \psi_m^* \hat{H} \psi_n dx$$

отримаємо:

$$i\hbar \frac{\partial b_m}{\partial t} = \sum_n H_{mn} b_n$$

- р-

ння Шредінгера у власному представленні. Для випадку енергетичного представлення ($A = E$) маємо:

$$H_{mn} = \int \psi_n^* \hat{H} \psi_m dx = E_m \delta_{mn} \Rightarrow i\hbar \frac{\partial b_m}{\partial t} = E_m b_m$$

- р-ння

Шредінгера в енергетичному представленні.

30 Спін електрона.

Спін – властивість електрона що впливає з врахування релятивістських ефектів. Дослід Штерна-Герлаха:

$$M_z = -\mu_B m; \mu_B = \frac{e\hbar}{2\mu c}, m = -l, -l + 1, \dots, 0, 1, \dots, l - 1, l$$

, ефект по виявленню магнітного моменту

атома.
$$W_{\vec{H}\vec{B}} = -\left(\vec{H}_z \vec{B}\right) = \mu_B B m = -\frac{e\hbar}{2\mu c} m \frac{\partial B}{\partial z} \vec{e}_z$$
 . Атоми в досліді

були в основному стані $1S \Rightarrow m=0, l=0 \Rightarrow F=0$. Очікувалось що потік не буде реагувати на поле. Насправді відбулось розщеплення

$$M_z = \pm \mu_B = \pm \frac{e\hbar}{2\mu c}$$

. Значить навіть в цьому стані магнітні моменти різні. Експеримент по дослідженню спектрів лужних металів. Дає нам 2 лінії за відсутності поля. Розщеплення пов'язане з власним магнітним моментом, і називається **дублет**. Припустимо що електрон має власний магнітний момент.

$$S_z = m_s \hbar; S^2 = h^2 I_s (I_s + 1), m_s = (2I_s + 1)$$

, по аналогії . З дублету видно $2I + 1 = 2, I_s = 1/2; m_s = \pm 1/2$. Уленберг и Гауданіт , базуючись на експериментах ввели теорію , що

$$\vec{S}, S = \pm \frac{\hbar}{2} = m\hbar ; m_s = \pm 1/2$$

$$\vec{M}_s, M_s = \pm M_B = \pm \frac{e\hbar}{2\mu c}; M_s = -\frac{e}{\mu c} S$$

, виявляється M_s не константа і спадає при підвищенні швидкості електрона. Ефект Ейнштейна – де-

Гааса. 1) Залізо крутиться всі M_i вишикувалися в одному

напрямку, поміняли відповідно з'явилося \vec{L}_z . Кожний атом

$$\vec{M} = \sum_i \vec{M}_i; \vec{L} = \sum_i \vec{L}_i \quad 2) \text{ Всі магнітні моменти перевернуться} \Rightarrow L_i$$

Якщо $H \neq H(\omega)$ можна досягти резонансу коливань

циліндра $\frac{M_z}{L_z} = -\frac{e}{\mu c}$ (В 2 рази більше) Причиною намагн феромагнетика є спін.

Теорія спіна електрона. $S, \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x = i\hbar \hat{L}_z$ (L,S -

оператор - з дахом!!!)
$$\begin{cases} S_x S_y - S_y S_x = i\hbar S_z \\ S_y S_z - S_z S_y = i\hbar S_x \\ S_z S_x - S_x S_z = i\hbar S_y \end{cases} \quad S_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i$$

$$\left(\sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x \right) \frac{\hbar^2}{4} = i\hbar \sigma_z \frac{\hbar^2}{2} \quad \begin{cases} \sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x = 2i\sigma_z \\ \sigma_y \sigma_z - \sigma_z \sigma_y = 2i\sigma_x \\ \sigma_z \sigma_x - \sigma_x \sigma_z = 2i\sigma_y \end{cases}$$

$$\sigma_x = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}; \sigma_y = \begin{vmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{vmatrix}; \sigma_z = \begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{vmatrix}; \text{ Будемо працювати в}$$

σ_z представлений для того, щоб σ_z був діагональним.

$$S_z | \text{експ} \rangle = \pm \frac{\hbar}{2} \text{ - з проекція спіну ->}$$

$$\sigma_z = \pm 1; \sum_n (\sigma_z)_{nm} b_n = \sigma_z b_n; \sum_n L_{nm} c_n = L c_n (L_{11} - L)$$

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix} \text{ . Далі розв'язуємо систему рівнянь і отримуємо}$$

$$\sigma_x = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}; \sigma_y = \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}; \sigma_z = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix} \text{ . Це все}$$

31 Матриці Паулі

(ВАРНИНГ!!!!!!! Над всіма S,L нада ставить галочку). $\hat{S} = \frac{h}{2} \hat{\sigma}$

$$\vec{S}^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$$

$$S = \frac{h^2}{4} \left\{ \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix} \right\} =$$

$$\frac{h^2}{4} \left\{ \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} \right\} = \frac{3}{4} h^2 \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} = \frac{3}{4} h^2 \hat{I} \quad \bar{L} = \sum_{n,m} C_n^* L_{nm} C_m;$$

$$\Psi \left(x, y, z, t; S = \pm \frac{h}{2} \right)$$

S – набір усіх можливих хв.ф. у просторі

(Варнинг!!!!!!! а тепер над всіма S нада ставить черточку!)

$$\Psi = \begin{vmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{vmatrix};$$

фактично Ψ розпадається на 2 функції .

$$L = \Psi^+ L \Psi = \begin{vmatrix} \Psi_1^* & \Psi_2^* \end{vmatrix} \begin{vmatrix} L_{11} & L_{12} \\ L_{21} & L_{22} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{vmatrix} \quad \text{Тоді рахуємо S заміняючи L на наші}$$

матриці:

$$S_x = \begin{vmatrix} \Psi_1^* & \Psi_2^* \end{vmatrix} S_x \begin{vmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \Psi_1^* & \Psi_2^* \end{vmatrix} \frac{h}{2} \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{vmatrix} = \frac{h}{2} \begin{vmatrix} \Psi_1^* & \Psi_2^* \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{vmatrix} = \frac{h}{2} \begin{vmatrix} \Psi_1^* \Psi_2 + \Psi_2^* \Psi_1 \end{vmatrix}$$

$$S_y = \begin{vmatrix} \Psi_1^* & \Psi_2^* \end{vmatrix} \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{vmatrix} \frac{h}{2} = \begin{vmatrix} \Psi_1^* & \Psi_2^* \end{vmatrix} \frac{h}{2} \begin{vmatrix} -i\Psi_1 \\ i\Psi_2 \end{vmatrix} = i \frac{h}{2} \left(\Psi_1^* \Psi_2 - \Psi_2^* \Psi_1 \right);$$

$$S_z = \begin{vmatrix} \Psi_1^* & \Psi_2^* \end{vmatrix} \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{vmatrix} \frac{h}{2} = \frac{h}{2} \left(|\Psi_1|^2 - |\Psi_2|^2 \right);$$

- орієнтація спіна. Якщо

два електрона з різною орієнтацією $S_z = 0$

Рівняння Паулі

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi; \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + \hat{U};$$

Який вигляд має рівняння Шредінгера

$$\vec{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}; \vec{F} = q\vec{E} + \frac{q}{c} [\vec{v} \times \vec{H}]$$

при наявності потенціалу

$$U = -\int \vec{F} d\vec{r} = -q \int \vec{E} d\vec{r} - \frac{q}{c} \int [\vec{v} \times \vec{H}] d\vec{r} = q\phi - \frac{q}{c} \int [\vec{v} \times [\nabla \times \vec{A}]] d\vec{r}$$

$$= q\phi - \frac{q}{c} \left\{ \int \nabla(\vec{v}\vec{A}) d\vec{r} - \int \vec{v}(\nabla\vec{A}) d\vec{r} \right\} = q\phi - \frac{q}{c} (\vec{v}\vec{A}) \quad U = q\phi - \frac{q}{c} (\vec{v}\vec{A})$$

Функція Лагранжа

$$L = \dot{\vec{r}} \cdot \vec{p} - V = \frac{\mu(x^2 + y^2 + z^2)}{2} - q\phi + \frac{q}{c} \vec{v}\vec{A}; \quad p_x = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \mu\dot{x} + \frac{q}{c} A_x;$$

$$\vec{p} = \mu\vec{v} + \frac{q}{c} \vec{A}; \quad \mu\dot{\vec{v}} = \vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A}$$

вигляд імпульсу при наявності

магнітного поля

$$\hat{T} = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} = \frac{\mu\vec{v}^2}{2} \rightarrow \frac{(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A})^2}{2\mu}$$

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{\left(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}\right)^2}{2\mu} + q\phi + U$$

- U наявність гравітаційної

взаємодії.

$$\hat{H} = \frac{\left(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}\right)^2}{2\mu} - e\phi + U; q = -e$$

$$\begin{aligned} \frac{\left(\bar{p} - \frac{q}{c}\bar{A}\right)^2}{2\mu} \Psi &= \frac{1}{2\mu} \left(-i\hbar\nabla + \frac{e}{c}\bar{A}\right)^2 \Psi = \\ &= \frac{1}{2\mu} \left(-i\hbar\nabla + \frac{e}{c}\bar{A}\right) \left(-i\hbar\nabla + \frac{e}{c}\bar{A}\right) \Psi = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta \Psi + \frac{1}{2\mu} \left(-i\hbar\nabla \left(\bar{A}\Psi i\hbar \frac{e}{c}\bar{A}\nabla\Psi\right)\right) + \frac{e^2 A^2}{2\mu c} \Psi \Rightarrow \\ \nabla\left(\bar{A}\Psi\right) &= \nabla\bar{A}\Psi + \bar{A}\nabla\Psi; \nabla\bar{A}\Psi = 0 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta - \frac{i\hbar e}{\mu c} \bar{A}\nabla + \frac{e^2 A^2}{2\mu c^2}\right) \Psi; H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta - \frac{i\hbar e}{\mu c} \bar{A}\nabla + \frac{e^2 A^2}{2\mu^2 c^2} + V + U;$$

$$-\frac{i\hbar e}{\mu c} \bar{A}\nabla$$

- аналог сили Лоренца, доданок, що виникає за рах

взаємодії з магнітним полем. $+\frac{e^2 A^2}{2\mu^2 c^2}$ має велику ступінь симетрії (не залежить від знаку e та A) Ефекти другого порядку:

(Нелінійні ефекти) $\bar{M} = -\frac{e}{\mu c} \bar{S}$ - власний магнітний момент Енергія взаємодії власного магнітного моменту з зовнішнім полем

$$\Delta W_{\bar{M}, \bar{H}} = -\left(\bar{M}, \bar{H}\right) = \frac{e\hbar}{\mu c} \bar{S} = \frac{e\hbar}{2\mu c} h\bar{\sigma} \quad \text{Тоді}$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{\mu} \Delta - \frac{i\hbar e}{\mu c} \bar{A}\nabla + \frac{e^2 A^2}{2\mu^2 c^2} - e\phi + U + \frac{e\hbar}{2\mu c} \bar{H}\bar{\sigma}$$

Звідки маємо рівняння Паулі з врахуванням впливу спіну на H

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad \text{З урахуванням магнітного поля! Де} \quad \Psi = \begin{vmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{vmatrix} .$$

32 Атом в магнитном поле.

Рассмотрим атом, находящийся в однородном магнитном поле \mathbf{H} .

Его гамильтониан
$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \sum_a \left[\hat{\mathbf{p}}_a + \frac{|e|\hbar}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_a) \right]^2 + U + \frac{|e|\hbar}{mc} \mathbf{H} \hat{\mathbf{S}}$$
 где

суммирование производится по всем электронам (заряд электрона записан как $-|e|$); U – энергия взаимодействия электронов с атомом

и друг с другом; $\hat{\mathbf{S}} = \sum \hat{\mathbf{S}}_a$ – оператор полного (электронного) спина атома. Если векторный потенциал поля выбран вдоль оси x ($A_z=A_y=0$), то оператор \mathbf{p} коммутативен с \mathbf{A} . Учитывая это

обстоятельство при раскрытии квадрата и обозначив через \hat{H}_0 гамильтониан атома в отсутствие поля, находим

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{|e|\hbar}{mc} \sum_a \hat{\mathbf{A}}_a \hat{\mathbf{p}}_a + \frac{e^2}{2mc^2} \sum_a \mathbf{A}_a^2 + \frac{|e|\hbar}{mc} \mathbf{H} \hat{\mathbf{S}}$$

. Подставив сюда \mathbf{A} ,

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

Но векторное произведение $[\mathbf{r}_a \hat{\mathbf{p}}_a]$ есть оператор орбитального момента электрона, а суммирование по всем электронам даст

оператор $\hbar \hat{\mathbf{L}}$ полного орбитального момента атома. Таким

образом,
$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \mu_B (\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}) \mathbf{H} + \frac{e^2}{8mc^2} \sum_a [\mathbf{H} \mathbf{r}_a]^2$$
 (μ_B – магнетон

Бора.) Оператор $\hat{\mu}_{at} = -\mu_B (\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}})$ можно рассматривать как оператор «собственного» магнитного момента атома, которым он обладает в отсутствие поля. Внешнее магнитное поле расщепляет

атомные уровни, снимая вырождение по направлениям полного момента (**эффект Зеемана**). Определим энергию этого расщепления для атомных уровней, который характеризуется

квантовыми числами J, L, S . Магнитное поле **СЛАБОЕ** $\mu_B H$ малое по сравнению с расстоянием между энергетическими уровнями. Теперь заюзаем приближение при котором член с полем в квадрате выкидываем как малый и оставляем второй тогда для изменения энергии получаем

$$\Delta E = \mu_B H (\bar{L}_z + 2\bar{S}_z) = \mu_B H (\bar{J}_z + \bar{S}_z)$$

Дальше юзаем хитрые формулы (пишу через одну через две ...)

$$\bar{S} = \text{const}; \bar{S}^2 = \text{const}^2 = \text{const} J(J+1); \bar{S} J = 1/2(J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)), \bar{S}_z = M_j \frac{JS}{J^2}$$

Подставив получим $\Delta E = \mu_B g M_j H$ где

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

это **множитель Ланде** или

Гиромагнитный множитель. (с) Кисленко. Теперь когда наше поле

сильное и $\mu_B H$ сравнимо с интервалами тонкой структуры или превышает их, расщепление уровней кардинально меняется и это явление называют **эффектом Пашена-бака**. Вычисление энергии расщепления весьма велико по сравнению с интервалами тонкой структуры, но конечно, по-прежнему мало по сравнению с расстояниями между различными мультиплетами. Другими словани енегрия магнитного поля значительно превышает взаимодействие спин-орбита. Поэтому в переходном приближении можна этим

взаимодействием пренебречь. И сохраняются проекции M_l, M_s орбитальный момент и спиновый, так что расщепление

определяется формулой $\Delta E = \mu_B H (M_l + 2M_s)$. Мультиплетное расщепление накладывается на расщепление в магнитном поле.

Оно определяется значением оператора $\hat{A}\hat{L}\hat{S}$ по состоянию с

данным M_l, M_s . Коротче $\overline{LS} = M_l M_s$. Так что после нашего приближения энергия будет определяться формулой

$$\Delta E = \mu_B H (M_l + 2M_s) + A M_l M_s.$$

Если у нас не \overline{LS} тип связи то

ничего сказать нельзя. Можно лишь утверждать, что расщепление (в слабом поле) линейно по полю и пропорционально проекции

M_j полного момента, т.е. имеет вид $\Delta E = \mu_B g_{nl} H M_j$ где g_{nl} -

некоторые коэффициенты, характерные для данного терма

(посредством n обозначаем совокупность квантовых чисел, кроме J , которые характеризуют терм.) Есть еще одна формула (к которой

мы типа шли в ландау) $\sum_n g_{nj} = \sum_{SL} g_{SLJ}$. (Суммирование

производится по всем состояниям с данным значением J ,

которые возможны для данной электронной конфигурации. Оба g

не зависят от M_l)

33 Движение в однородном магнитном поле.

Определим уровни энергии частицы в постоянном однородном магнитном поле. Векторный потенциал магнитного поля здесь

выберем как $A_x = -Hy, A_y = A_z = 0$ Тогда гамильтониан

приобретает вид
$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(p_x + \frac{eH}{c} y \right)^2 + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} - \frac{\mu}{s} \hat{s}_z H$$

Прежде всего замечаем, что оператор \hat{s}_z коммутативен с гамильтонианом (поскольку последний не содержит других компонент спина). Это значит что z-проекция спина сохраняется и

поэтому \hat{s}_z можно заменить собственным значением $S_z = \sigma$ после этого спиновая зависимость волновой функции становится

несущественной и Ψ в уравнении Шредингера можно понимать как обычную координатную функцию. Для этой функции имеем

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

Гамильтониан этого уравнения не содержит явно координат x и z.

Поэтому с ним коммутативны также операторы \hat{p}_x и \hat{p}_z (дифференцирования по x и по z), т.е. x- и z-компоненты обобщенного импульса сохраняются. Соответственно этому ищем

Ψ в виде $\Psi = e^{\frac{i}{h}(p_x x + p_z z)} X(y)$ Собственные значения p_x и p_z

пробегают все значения от $-\infty$ до ∞ . Поскольку $A_z = 0$, то z-компонента обобщенного импульса совпадает с компонентой

обычного импульса mv_z . Таким образом, скорость частицы в направлении поля может иметь произвольное значение; можно сказать, что движение вдоль поля «не квантуется».

Подставив получим следующее уравнение для функции

$$X(y) : X'' + \frac{2m}{h^2} \left[\left(E + \frac{\mu\sigma}{s} H - \frac{p_z^2}{2m} \right) - \frac{m}{2} \omega_H^2 (y - y_0)^2 \right] X = 0$$

где введены обозначения $y_0 = -\frac{cp_x}{eH}$; $\omega_H = \frac{|e|H}{mc}$ Предыдущее уравнение по форме совпадает с уравнением Шредингера для

линейного осциллятора, колеблющегося с частотой ω_H . Поэтому мы можем сразу заключить, что выражение в круглых скобках, играющее роль энергии осциллятора, может принимать значения

$$\left(n + \frac{1}{2} \right) h\omega_H, \text{ где } n = 0, 1, 2, \dots$$

Таким образом, получаем следующее выражение для уровней энергии частицы в однородном магнитном поле:

$$E = \left(n + \frac{1}{2} \right) h\omega_H + \frac{p_z^2}{2m} - \frac{\mu\sigma}{s} H \quad (*)$$

Первый член в этом выражении дает дискретные значения энергии отвечающие движению в плоскости, перпендикулярной к полю, их называют уровнями Ландау. Для

электрона $\frac{\mu}{s} = -|e|\frac{h}{mc}$, и формула (*) принимает вид

$$E = \left(n + \frac{1}{2} + \sigma \right) h\omega_H + \frac{p_z^2}{2m}; \text{ Собственные функции } X_n(y)$$

отвечающие уровням энергии, .

$$X_n(y) = \frac{1}{\pi^{1/4} a_H^{1/2} \sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{(y - y_0)^2}{2a_H^2} \right) H_n\left(\frac{y - y_0}{a_H} \right), a_H = \sqrt{h / m\omega_H} \quad \text{Для}$$

электрона имеют место еще дополнительные вырождение: уровни энергии совпадают для состояний с квантовыми числами

$$n, \sigma = 1/2 \text{ и } n+1, \sigma = -1/2 .$$

34 Стан електронів в атомах з урахуванням спіну.

Атом с более чем одним електроном представляет собой сложную систему взаимодействующих друг с другом электронов, движущихся в поле ядра. Короче ... Все электроны находятся в центральносимметричном поле а для разных электронов эти поля будут разные поэтому поля должны определяться одновременно а такие поля называют самосогласованными. Эти поля характеризуются определенным значением его орбитального момента l . Состояния отдельного электрона при заданом l нумеруются с помощью главного квантового числа $n=l+1, l+2, \dots$. Такой выбор порядка нумерации устанавливают в соответствии с тем который принят для атома

водорода. У водорода $l=0$ а если $l \neq 0$; то l всегда круче n ; то есть уровень с $n=5, l=0$ лежит ниже уровня с $n=4, l=2$ (про вариант когда $l+n=\text{const}$ ничего не сказано ☹). Каждое состояние которое характеризуется парой l и n обозначается цифрой и символом (символика для атома) Например: $l=2, n=4$ – 4d. При заданных значениях n и l электрон может обладать различными значениями

проекций орбитального момента (m) и спина (σ) на ось z . При заданом l число m пробегает $2l+1$ значений, число же σ

ограничено двумя значениями $\pm 1/2$. Поэтому всего имеется $2(2l+1)$ различных состояний с одинаковыми n и l такие состояния называют эквивалентными. В каждом из них может находиться согласно принципу Паули, по одному электрону. Таким образом в атоме могут одновременно иметь одинаковые n и l не более $2(2l+1)$ электронов. О совокупности электронов заполняющих все состояния с данными n и l , говорят, как о замкнутой оболочке данного типа.

35 ПРИНЦИП НЕРОЗРІЗНЮВАННОСТІ ТОТОЖНИХ ЧАСТИНОК ТА ЙОГО НАСЛІДКИ.

В квантовій механіці в силу принципу неопределенності, поняття о траєкторії електрона повністю втрачає сенс. Якщо положення електрона точно відомо в поточний момент часу, то вже в наступний момент його координати взагалі не мають ніякого визначеного значення. Тому, локалізав електрони і перенумерував їх в деякий момент часу, ми цим нічого не доб'ємося для цілей їх ідентифікації в наступні моменти часу; локалізав один з електронів в інший момент часу в певній точці простору, ми не зможемо вказати, якою саме з електронів потрапив в цю точку. В квантовій механіці принципово не існує ніякої можливості слідити окремо за кожним з однакових частинок і тим самим розрізняти їх. Однаковість частинок по їх фізичним властивостям має, тут дуже глибокий характер — вона призводить до повної нерозличимості частинок.

Цей, як кажуть, *принцип нерозличимості* однакових частинок грає основну роль в квантовій теорії систем, складених з однакових частин. Почнемо з розгляду системи, складеної з двох частинок. В силу їх тотожності, стани системи, що отримуються одне з одного просто перестановкою обох частинок, повинні бути фізично повністю еквівалентними. Це означає, що в результаті такої перестановки хвильова функція системи може змінюватися тільки на несуттєвий фазовий множитель.

СИМЕТРИЧНІ ТА АНТИСИМЕТРИЧНІ ХВИЛЬОВІ ФУНКЦІЇ І РОЛЬ СПІНА ЧАСТИНОК.

Нехай $\psi(\xi_1, \xi_2)$ — хвильова функція системи, причому

ξ_1, ξ_2 умовно позначають сукупності трьох координат і проекції спіна кожної з частинок. Тоді повинно бути

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = e^{i\alpha} \psi(\xi_2, \xi_1)$$

где α — некоторая вещественная постоянная. В результате повторной перестановки мы вернемся к исходному состоянию, между тем как функция ψ окажется умноженной на $e^{2i\alpha}$

. Отсюда следует, что $e^{2i\alpha} = 1$ или $e^{i\alpha} = \pm 1$. Таким образом,
$$\psi(\xi_1, \xi_2) = \pm \psi(\xi_2, \xi_1)$$

Мы приходим к результату, что имеется всего две возможности — волновая функция либо симметрична (т. е. совершенно не меняется в результате перестановки частиц), либо антисимметрична (т. е. при перестановке меняет знак). Очевидно, что волновые функции всех состояний одной и той же системы должны иметь одинаковую симметрию; в противном случае волновая функция состояния, представляющего собой суперпозицию состояний различной симметрии, была бы ни симметрична, ни антисимметрична.

Этот результат непосредственно обобщается на системы, состоящие из произвольного числа одинаковых частиц. Если какая-либо их пара обладает свойством-описываться, скажем, симметричными волновыми функциями, то и всякая другая пара таких же частиц будет обладать тем же свойством. Поэтому волновая функция одинаковых частиц должна либо совершенно не меняться при перестановке любой пары частиц (а потому и при всякой вообще взаимной перестановке частиц), либо менять знак при перестановке каждой пары. В первом случае говорят о *симметричной*, а во втором случае — об *антисимметричной* волновой функции.

36 ФЕРМИОНИ ТА БОЗОНИ.

Свойство описываться либо симметричными, либо антисимметричными волновыми функциями зависит от рода частиц. О частицах, описываемых антисимметричными функциями, говорят, как о подчиняющихся статистике Ферми — Дирака или о фермионах, а о частицах, описываемых симметричными функциями — как подчиняющихся статистике Бозе — Эйнштейна или о бозонах').

Опытным путём установлено, что Ψ системы одинаковых частиц будет симметричной Ψ_s если спин целый ($s_z = m\hbar, m = 0, 1, 2, \dots$) и антисимметричной Ψ_a если спин полуцелый ($s_z = (2m + 1)\hbar, m = 0, 1, 2, \dots$). Из законов релятивистской квантовой механики оказывается возможным показать (см. IV, § 25), что статистика, которой подчиняются частицы, однозначно связана с их спином! Частицы с полуцелым спином являются фермионами, а с целым спином — бозонами. Статистика сложных частиц определяется четностью числа входящих в их состав элементарных фермионов — перестановка двух одинаковых сложных частиц эквивалентна одновременной перестановке нескольких пар одинаковых элементарных частиц. Перестановка бозонов не изменяет волновой функции вообще, а перестановка фермионов меняет ее знак. Поэтому сложные частицы, содержащие нечетное число элементарных фермионов, подчиняются статистике Ферми, а содержащие четное число их, — статистике Бозе. Этот результат находится, конечно, в согласии с указанным выше общим правилом: сложная частица имеет целый или полуцелый спин в зависимости от того, четно или нечетно число входящих в ее состав частиц с полуцелым спином.

Так, атомные ядра с нечетным атомным весом (т. е. состоящие из нечетного числа протонов и нейтронов) подчиняются статистике Ферми, а с четным весом — статистике Бозе. Для атомов же, содержащих наряду с ядрами также и электроны, статистика определяется очевидно, четностью или нечетностью суммы атомного веса и атомного номера.

37 ПРИНЦИП ПАУЛИ.

Рассмотрим систему, состоящую из N одинаковых частиц, взаимодействием которых друг с другом можно пренебречь. Пусть

ψ_1, ψ_2, \dots — волновые функции различных стационарных состояний, в которых может находиться каждая из частиц в отдельности. Состояние системы в целом определяется перечислением номеров состояний, в которых находятся отдельные частицы. Волновая функция Ψ всей системы в целом

должна быть составлена из функций ψ_1, ψ_2, \dots таким образом

Пусть p_1, p_2, \dots, p_N — номера состояний, в которых находятся отдельные частицы (среди этих номеров могут быть и одинаковые). Для системы бозонов волновая функция

$\psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N)$ выражается суммой произведений вида

$$\psi_{p_1}(\xi_1)\psi_{p_2}(\xi_2)\dots\psi_{p_N}(\xi_N) \quad (*1*)$$

со всеми возможными перестановками различных индексов p_i ; такая сумма обладает, очевидно, требуемым свойством симметрии. Так, для системы из двух частиц, находящихся в различных ($p_1 \neq p_2$)

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{p_1}(\xi_1)\psi_{p_2}(\xi_2) + \psi_{p_1}(\xi_2)\psi_{p_2}(\xi_1)]$$

состояниях:

(*2*) Множитель $1/\sqrt{2}$ введен для нормировки (все функции

$\psi_1, \psi_2 \dots$ взаимно ортогональны и предполагаются нормированными)] В общем же случае системы произвольного числа частиц N нормированная волновая функция

$$\Psi = \left(\frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \right)^{1/2} \sum \psi_{p_1}(\xi_1)\psi_{p_2}(\xi_2)\dots\psi_{p_N}(\xi_N)$$

где сумма берется

по всем перестановкам различных из индексов p_1, p_2, \dots, p_N числа

N_i указывают, сколько из всех этих индексов имеют одинаковые значения i (при этом $\sum N_i = N$ - При интегрировании квадрата

$|\psi|^2$ по $d\xi_1 d\xi_2 \dots d\xi_N$ обращаются в нуль все члены, за исключением только квадратов модулей каждого из членов суммы; Для системы фермионов волновая функция ψ есть антисимметричная комбинация произведений (*1*). Так, для системы из двух частиц имеем (*2*) В общем же случае N частиц волновая функция системы сывается в виде определителя

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{p_1}(\xi_1) & \psi_{p_1}(\xi_2) \dots & \psi_{p_1}(\xi_N) \\ \psi_{p_2}(\xi_1) & \psi_{p_2}(\xi_2) \dots & \psi_{p_2}(\xi_N) \\ \dots & \dots & \dots \\ \psi_{p_N}(\xi_1) & \psi_{p_N}(\xi_2) \dots & \psi_{p_N}(\xi_N) \end{vmatrix} \quad (*3*)$$

Перестановке двух частиц соответствует здесь соответствует перестановка столбцов определителя, в результате чего последний меняет знак. Из выражения (*3*) следует важный

результат: если среди номеров $p_1, p_2 \dots$ есть два одинаковых, то две строки определителя окажутся одинаковыми и весь определитель обратится тождественно в нуль. Он будет отличным от нуля только в тех случаях, когда все номера $p_1, p_2 \dots$ различны. Таким образом в системе одинаковых фермионов не могут одновременно находиться в одном и том же состоянии две (или более) частицы. Это — так называемый принцип Паули .

38 ОБМІННА ВЗАЄМОДІЯ.

Электрическое взаимодействие частиц не зависит от их спинов(нерелятивистский случай). Математически это означает, что гамильтониан системы электрически взаимодействующих частиц (в отсутствие магнитного поля) не содержит операторов спина и потому при применении его к волновой функции никак не воздействует на спиновые переменные. Поэтому уравнению Шредингера удовлетворяет в действительности каждая из компонент волновой функции; другими словами, волновая функция системы частиц может быть написана в виде

произведения
$$\psi(\xi_1, \xi_2) = \chi(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3 \dots) \varphi(r_1, r_2, \dots) \quad (*1*)$$

где функция φ зависит только от координат частиц, а функция χ — только от их спинов; о первой будем говорить как о координатной или орбитальной, а о второй — как о спиновой волновой функции. Уравнение Шредингера определяет по существу только координатную функцию φ , оставляя функцию χ произвольной. Во всех случаях, когда сам спин частиц нас не интересует, можно, следовательно, применять уравнение Шредингера, рассматривая в качестве волновой функции одну только координатную функцию, Существует своеобразная ЗАВИСИМОСТЬ энергии системы от ее полного СПИНА, проистекающая из принципа неразличимости одинаковых частиц. Рассмотрим систему, состоящую всего из двух одинаковых частиц. В результате решения уравнения Шредингера мы найдем ряд уровней энергии, каждому из которых соответствует определенная симметричная или антисимметричная координатная волновая функция $\varphi(r_1, r_2, \dots)$. Действительно, в силу одинаковости частиц гамильтониан (а с ним и уравнение Шредингера) системы инвариантен по отношению к их перестановке. Если уровни энергии не вырождены, то при перестановке координат r_1 и r_2 функция $\varphi(r_1, r_2)$ может измениться только на постоянный множитель; производя же перестановку еще раз, убедимся, что этот множитель может быть равен только ± 1 ²). Предположим сначала, что частицы имеют спин нуль. Спиновый

множитель для таких частиц вообще отсутствует, и волновая функция сводится к одной лишь координатной функции $\phi(r_1, r_2)$, которая должна быть симметричной (поскольку частицы со спином). Для системы двух частиц те уровни энергии, которым соответствуют симметричные решения $\phi(r_1, r_2)$ уравнения Шредингера, могут фактически осуществляться при равном нулю полном спине системы, т. е. когда спины обоих электронов «антнпараллельны», давая в сумме нуль. Значения же энергии, связанные с антисимметричными функциями $\phi(r_1, r_2)$, требуют равного единице полного спина, т. е. спины обоих электронов должны быть «параллельными». Другими словами, возможные значения энергии системы электронов оказываются зависящими от ее полного спина. На этом основании можно говорить о некотором своеобразном взаимодействии частиц, приводящем к этой зависимости. Это взаимодействие называют обменным. Оно представляет собой чисто квантовый эффект, полностью исчезающий (как и самый спин) при предельном переходе к классической механике. Таким образом, мы приходим к результату, что координатная волновая функция системы двух одинаковых частиц симметрична при четном и антисимметрична при нечетном полном спине. Вспоминая сказанное выше о связи между перестановкой частиц и инверсией системы координат, заключаем также, что при четном (нечетном) спине S система может обладать только четным (нечетным) орбитальным моментом. Мы видим, что и здесь обнаруживается некоторая зависимость между возможными значениями энергии системы и полным спином, но эта зависимость не вполне однозначна. Уровни энергии, которым соответствуют симметричные (антисимметричные) координатные волновые функции, могут осуществляться при всех четных (нечетных) значениях S .

A – Кулоновский, а I – обменный интегралы. Величина ΔE – различие энергий между состояниями отвечающим различным значениям полного спина

$$E_{00} = E_1 + E_2 + A + I$$

$$E_{1,sz} = E_1 + E_2 + A + I$$

$$A = \int \psi_1^*(\vec{r}_1) \psi_2^*(\vec{r}_2) U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \psi_2(\vec{r}_2) \psi_1(\vec{r}_1) d^3 r_1 d^3 r_2$$

$$I = \int \psi_1^*(\vec{r}_1) \psi_2^*(\vec{r}_2) U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \psi_1(\vec{r}_2) \psi_2(\vec{r}_1) d^3 r_1 d^3 r_2$$

$$\Delta E = E_{00} + E_{1,sz} = 2I$$

39 СИСТЕМАТИКА ТА ПОЗНАЧЕННЯ ЕНЕРГЕТИЧНИХ РІВНІВ БАГАТОЕЛЕКТРОННИХ АТОМІВ.

Атомные уровни энергии (*спектральные термы* атомов) принято обозначать символами, аналогичными тем, которые используются для обозначения состояний отдельных частиц с определенными значениями момента (§ 32). Именно, состояния с различными значениями полного орбитального момента L обозначаются большими буквами латинского алфавита со следующим соответствием:

$L = 0 \quad 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad 5 \quad 6 \quad 7 \quad 8 \quad 9 \quad 10$
... $S \quad P \quad D \quad F \quad G \quad H \quad J \quad K \quad L \quad M \quad N \dots$,

Атом с более чем одним электроном представляет собой сложную систему взаимодействующих друг с другом электронов, движущихся в поле ядра. Для такой системы можно, строго говоря, рассматривать только состояния системы в целом. Оказывается, что в атоме можно ввести понятие о состояниях каждого электрона в отдельности, как о стационарных состояниях движения электрона в некотором эффективном центрально-симметричном поле, созданном ядром вместе со всеми остальными электронами. Такое поле называется самосогласованным.

Поскольку самосогласованное поле центрально-симметрично, то каждое состояние электрона характеризуется определенным значением его орбитального момента l . Состояния отдельного электрона при заданном l нумеруются (в порядке возрастания их энергии) с помощью главного квантового числа n , пробегающего значения $n = l + 1, l + 2, \dots$; такой выбор порядка нумерации устанавливается в соответствии с тем, который принят для атома водорода. Но последовательность возрастания уровней энергии с различными l в сложных атомах, отличается от имеющей место у атома водорода. В последнем энергия вообще не зависит от l , так что состояния с большими n всегда обладают большей энергией. Состояния отдельных электронов с различными n и l принято обозначать символом, состоящим из цифры, указывающей значение главного квантового числа, и буквы, указывающей значение l ¹).

Так, $4d$ обозначает состояние с $n = 4$, $l = 2$. Полное описание состояния атома требует, наряду с указанием значений полных L , S , J , также и перечисления состояний всех электронов. Так, символ $1s 2p^3 P_0$ обозначает состояние атома гелия, в котором $L=1, S=1, J=0$ а два электрона находятся в состояниях $1s$ и $2p$. Если несколько электронов находится в состояниях с одинаковыми l и n , то это принято обозначать для краткости в виде показателя степени; так, $3p^2$ обозначает два электрона в состояниях $3p$. О распределении электронов в атоме по состояниям с различными l , n говорят, как об электронной конфигурации.

При заданных значениях n и l электрон может обладать различными значениями проекций орбитального момента (m) и спина (s) на ось z . При заданном l число m пробегает $2l + 1$ значений; число же s ограничено всего двумя значениями $\pm 1/2$. Поэтому всего имеется $2(2l + 1)$ различных состояний с одинаковыми n , l ; такие состояния называют эквивалентными. В каждом из них может находиться, согласно принципу Паули, по одному электрону. Таким образом, в атоме может одновременно иметь одинаковые n , l не более $2(2l + 1)$ электронов. О совокупности электронов, заполняющих все состояния с данными n , l , говорят как о замкнутой оболочке данного типа.

Различие в энергии атомных уровней, обладающих различными L , S при одинаковой электронной конфигурации, связано с электростатическим взаимодействием электронов. Обычно разности этих энергий сравнительно малы — в несколько раз меньше расстояний между уровнями с различными конфигурациями. По поводу взаимного расположения уровней с одинаковой конфигурацией, но различными L , S существует следующее эмпирически установленное правило Хунда **Наименьшей энергией обладает терм с наибольшим возможным при данной электронной конфигурации значением S и наибольшим (возможным при этом S) значением L .**

Покажем, каким образом можно найти возможные для данной электронной конфигурации атомные термы. Если электроны не

эквивалентны, то определение возможных значений l, S производится непосредственно по правилу сложения моментов. Так, при конфигурации $n\ell, n'\ell'$ (с различными n, n') суммарный момент L может иметь значения $2, 1, 0$, а суммарный спин $S = 0, 1$; комбинируя их друг с другом, получим термы ${}^1S, {}^3S, {}^1P, {}^3P$. Если же мы имеем дело с эквивалентными электронами, то появляются ограничения, налагаемые принципом Паули. Рассмотрим, например, конфигурацию из трех эквивалентных p -электронов. При $l = 1$ (p -состояние) проекция m орбитального момента может иметь значения $m = L, 0, -1$, так что возможны шесть состояний со следующими парами чисел n, l

а) $1, 1/2$, б) $0, 1/2$, в) $-1, 1/2$,

а') $1, -1/2$, б') $0, -1/2$, в') $-1, -1/2$.

Три электрона можно расположить по одному в трех любых из этих состояний. В результате получим состояния атома со следующими значениями проекций $M_L = \sum m_l, M_S = \sum m_s$ и полного орбитального момента и спина;

а + а' + б) $2, 1/2$, а + а' + в) $1, 1/2$, а + б + в) $0, 3/2$,

а + б + б') $1, 1/2$ а + б + в') $0, 1/2$,

а + б' + в) $0, 1/2$,

а' + б + в) $0, 1/2$

(состояний с отрицательными значениями M_L, M_S можно не выписывать, так как они не дают ничего нового). Наличие состояния с $M_L = 2, M_S = 1/2$ показывает, что должен иметься терм 2D этому терму должны соответствовать еще и по одному состоянию $(1, 1/2), (0, 1/2)$. Далее, остается еще одно состояние с $(1, 1/2)$, так что должен иметься терм 2P ; ему отвечает также и одно из состояний с $(0, 1/2)$. Наконец, остаются еще состояния $(0, 3/2)$ и $(0, 1/2)$, которые соответствуют терму 4S . Таким образом, для конфигурации из трех эквивалентных p -электронов возможны лишь по одному терму типов ${}^2D, {}^2P, {}^4S$.

При применении правила Хунда для определения нормального терма атома по известной электронной конфигурации надо рас-

считать только незаполненную оболочку, поскольку моменты электронов в заполненных оболочках взаимно компенсируются. Пусть, например, вне замкнутых оболочек в атоме имеется четыре d-электрона. Магнитное квантовое число d-электрона может принимать пять значений: $0, \pm 1, \pm 2$. Поэтому все четыре электрона могут иметь одинаковую проекцию спина $a = 1/2$, так что максимальный возможный полный спин есть $S=2$. После этого мы должны приписать электронам различные значения числа m ,

которые дали бы наибольшее значение $M_L = \sum m$; это $2, 1, 0, -1$, так что $M_L = 2$. Это значит, что и наибольшее возможное при $S = 2$ значение L равно 2 (терм 5D).

В Водородоподобных атомах для уровней энергии получится выражение, отличающееся от водородного заменой радиального, или, что то же, главного квантового числа n на $n + \Delta_l$ где Δ_l — некоторая постоянная (так называемая поправка Ридберга):

$$E = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{(n + \Delta_l)^2}$$

Поправка Ридберга не зависит (по самому своему определению) от n , но является, конечно, функцией азимутального квантового числа l возбужденного электрона (которые мы приписываем к Δ в виде индекса), а также от моментов L и S атома в целом. При заданных L и S Δ_l быстро убывает с увеличением l . Чем больше l , тем меньше времени электрон проводит вблизи ядра, а потому уровни энергии должны все больше приближаться к водородным

40 СПИН-ОРБИТАЛЬНЫЙ СВЯЗОК ТА ЙОГО ТИПИ.

Релятивистские члены в гамильтониане атомов распадаются на две категории — одни из них линейны относительно операторов спинов электронов, а другие квадратичны по ним. Первые соответствуют как бы взаимодействию орбитального движения электронов с их спинами; его называют *спин-орбитальным взаимодействием*. Вторые же отвечают взаимодействию между спинами электронов (*взаимодействие спин — спин*). Оба вида взаимодействий одинакового порядка (второго) по v/c — отношению скорости электронов к скорости света.

Спин-орбитальное взаимодействие быстро растет с увеличением атомного номера, между тем как спин-спиновое в основном вообще не зависит от Z .

Оператор взаимодействия спин — орбита имеет вид
$$\hat{V}_{sl} = \sum_a \hat{A}_a \hat{s}_a$$
 (суммирование по всем электронам в атоме), где s_a — операторы спинов электронов, а A_a — некоторые «орбитальные» операторы, т. е. операторы, действующие на функции координат. В

приближении самосогласованного поля $\hat{A}_a \sim \hat{l}_a$ орбитального момента электронов, и тогда можно написать V_{sl} в виде

$$\hat{V}_{sl} = \sum_a \alpha_a \hat{l}_a \hat{s}_a$$
 (*1*) Здесь α_a выражаются через потенциальную энергию $U(r)$ электрона в самосогласованном поле

$$\alpha_a = \frac{\hbar^2}{2m^2 c^2 r_a} \frac{dU(r_a)}{dr_a}$$
 Поскольку $|U(r)|$ убывает с удалением от

ядра, все $\alpha_a > 0$.. Вычисления энергии, усредняем α_a по невозмущенному состоянию. Основной вклад дает область близких к ядру расстояний - расстояния порядка величины

боровского радиуса ($\sim \hbar^2 / Zme^2$) для ядра с зарядом Ze . В этой

области поле ядра практически не экранировано и потенциальная энергия $|U(r)| \sim Ze^2/r \sim Z^2 m e^4 / \hbar^2$ так что

$$\alpha \sim \hbar^2 U / m^2 c^2 r^2 \sim Z^4 (e^2 / \hbar c)^2 m e^4 / \hbar^2 . \bar{\alpha} \text{ получится}$$

отсюда умножением на вероятность ω нахождения электрона

вблизи ядра. $\omega \sim Z^{-2}$, так что энергия спин-орбитального

взаимодействия электрона $\bar{\alpha} \sim (Ze^2 / \hbar c)^2 m e^4 / \hbar^2$ т. е. отличается

от основной энергии внешнего электрона в атоме ($\sim m e^4 / \hbar^2$) ~

только множителем $(Ze^2 / \hbar c)^2$. Этот множитель быстро растет с увеличением атомного номера и в тяжелых атомах оказывается порядка единицы.

Усреднение \hat{V}_{sl} производится в два этапа. Прежде всего усредняем по электронному состоянию атома с заданными величинами L и S полных орбитального момента и спина атома, но

не по их направлениям. После такого усреднения \hat{V}_{sl} еще оператор, который, однако, должен уже выражаться лишь через операторы величин, характеризующих атом в целом (а не отдельные электроны в нем). Таковыми являются операторы L и S. Обозначим оператор усредненного таким образом спин-орбитального взаимодействия через

\hat{V}_{SL} - Будучи линеен по S, он имеет вид $\hat{V}_{SL} = A \hat{S} \hat{L}$ где A —

const, характерная для данного (нерасщепленного) терма, т. е. зависящая от S и L, но не от полного момента J атома Для

вычисления энергии расщепления вырожденного уровня надо теперь решить секулярное уравнение, составленное из матричных

элементов оператора \hat{V}_{SL} . В данном случае, однако, мы заранее

знаем правильные функции нулевого приближения, в которых матрица V_{sl} , диагональна. Это — волновые функции состояний с определенными значениями полного момента J . Усреднение по такому состоянию означает замену оператора \hat{S}_l его собственным значением:

$$LS = 1/2[J(J + 1) - L(L + 1) - S(S + 1)] \quad \text{Энергия расщепления}$$

$(1/2)AJ(J + 1)$ Интервалы между соседними компонентами

$\Delta E_{J,J-1} = AJ$ - ЭТО ПРАВИЛО ИНТЕГРАЛОВ ЛАНДЕ. Постоянная A может быть как $A > 0$, так и $A < 0$. При $A > 0$ min из компонент мульти-плетного уровня является уровень с min возможным J , т. е. $J = L - S$; такие мультиплеты называют

нормальными. Если $A < 0$, то min является уровень с $J = L + S$ (обращенный мультиплет). Если есть всего одна не вполне заполненная оболочка, и она заполнена не более чем наполовину, то, по правилу Хунда все n электронов в ней имеют параллельные спины так, чтобы полный спин имел max возможное значение $S = n/2$. Подставив в (*1*) $s_0 = S/n$ и вынеся a , {одинаковое для всех электронов в одной оболочке) за знак \sum то, получим

$\hat{V}_{SL} = \frac{a}{2S} \hat{S} \hat{L}$ т. е. $A = a/2S > 0$. Если же оболочка заполнена более чем наполовину, то предварительно прибавим и вычтем из (*1*) такую же сумму, взятую по свободным вакансиям — дыркам в незаполненной оболочке. Поскольку для полностью заполненной

оболочки было бы $V_{sl} = 0$, то в результате оператор \hat{V}_{SL}

представится в виде суммы $\hat{V}_{sl} = \sum \alpha_a \hat{l}_a \hat{s}_a$ взятой только по дыркам, причем полные спин и орбитальный момент атома

$S = -\sum s_a, L = -\sum l_a$ Аналогично получим поэтому $A = -a/2S$, т. е. $A < 0$. Отсюда вытекает простое правило, определяющее значение J в нормальном состоянии атома с одной не вполне заполненной оболочкой. Если в последней находится не более половины

максимально возможного для нее числа электронов, то $J = |L - S|$,
Если же оболочка заполнена более чем наполовину, то $J = L + S$.

ТИПЫ (плохо описано)

Изложенная в здесь (вся шпора особенно начало) схема построения атомных уровней основана на представлении, что орбитальные моменты электронов складываются в полный орбитальный момент L атома, а их спины — в полный спин S . Как уже указывалось, такое рассмотрение возможно лишь при условии малости релятивистских эффектов; точнее, интервалы тонкой структуры должны быть малы по сравнению с разностями уровней с различными L, S . Такое приближение называют *рассель-саундеровским* случаем (Я. Russel, F. Saunders, 1925); говорят также об *LS-типе связи*.

В противоположном предельном случае релятивистское взаимодействие велико по сравнению с электростатическим (точнее, по сравнению с той частью последнего, с которой связана зависимость энергии от L и S). В этом случае нельзя говорить об орбитальном моменте и спине в отдельности, поскольку они не сохраняются. Отдельные электроны характеризуются своими полными моментами j , складывающимися в общий полный момент атома J . О такой схеме построения атомных уровней говорят, как о *jj-типе связи*. Фактически в чистом виде этот тип связи не встречается; среди уровней очень тяжелых атомов наблюдаются различные промежуточные между LS- и jj-типами виды связи¹⁾.

41 ПЕРІОДИЧНА СИСТЕМА ЕЛЕМЕНТІВ МЕНДЕЛЄЄВА.

Номер елемента – главное квантовое число n . Группа элемента равна L -орбитальному квантовому числу.

При переходе от одного атома к следующему' увеличивается на единицу заряд и к оболочке' добавляется один электрон. На первый взгляд можно было бы ожидать, что энергии связи каждого из последовательно добавляемых электронов обнаружат монотонное изменение с увеличением атомного номера. В действительности, однако, это не так. В- нормальном состоянии атома водорода имеется всего один добавляется еще один электрон в том же состоянии $1s$. Энергия связи каждого из $1s$ -электронов в атоме гелия, однако, значительно больше, чем энергия связи электрона в атоме водорода. Это обстоятельство является естественным следствием различия между полем, в котором находится электрон в атоме H , и полем, в которое попадает электрон, добавляемый к иону He^* : на больших расстояниях эти поля примерно совпадают, но вблизи ядра с зарядом $Z = 2$ поле иона He^* сильнее, чем поле ядра атома водорода с $Z = 1$. В атоме лития ($Z = 3$) третий электрон попадает в состоя - временно более двух электронов. При заданном Z уровень $2s$ расположен выше уровня $1s$; по мере увеличения заряда ядра тот и другой понижаются. Однако при переходе от $Z = 2$ к $Z = 3$ первый эффект значительно преобладает над вторым, и потому энергия связи третьего электрона в атоме Li значительно меньше энергии связи электронов в атоме гелия. Далее, в атомах от De ($Z = 4$) до Ne ($Z = 10$) последовательно добавляются сначала еще один $2z$ -электрон, а затем шесть $2p$ -электронов. Энергии заряда ядра, в общем растут. Следующий же добавляемый при переходе к атому Na ($Z = 11$) электрон попадает в состояние $3s$; эффект перехода в более высокую оболочку при этом преобладает над эффектом увеличения заряда ядра, и энергия связи снова сильно падает.

Такая картина заполнения электронных оболочек характерна для всей последовательности элементов. Все электронные состояния

можно распределить по последовательно заполняющимся группам: по мере заполнения в ряду элементов каждой из них энергия связи в общем растет, но в момент начала заполнения состояний следующей группы энергия связи сильно падает, На рис. нанесены известные из спектроскопических данных ионизационные потенциалы элементов; они определяют энергии связи электронов, добавляемых при переходе от каждого элемента к следующему. Различные состояния распределяются на последовательно заполняющиеся группы следующим образом;

- 1s 2 электрона,
- 2s, 2p.....8 электронов,
- 3s, 3p.....8 электронов,
- 4s, 3d, 4p 18 электронов,
- 5s, 4d, 5p 18 электронов,
- 6s, 4f, 5d, 6p . . . 32 электрона,
- 7s, 6d, 5f ...

Первая группа заполняется в H и He; заполнение второй и третьей

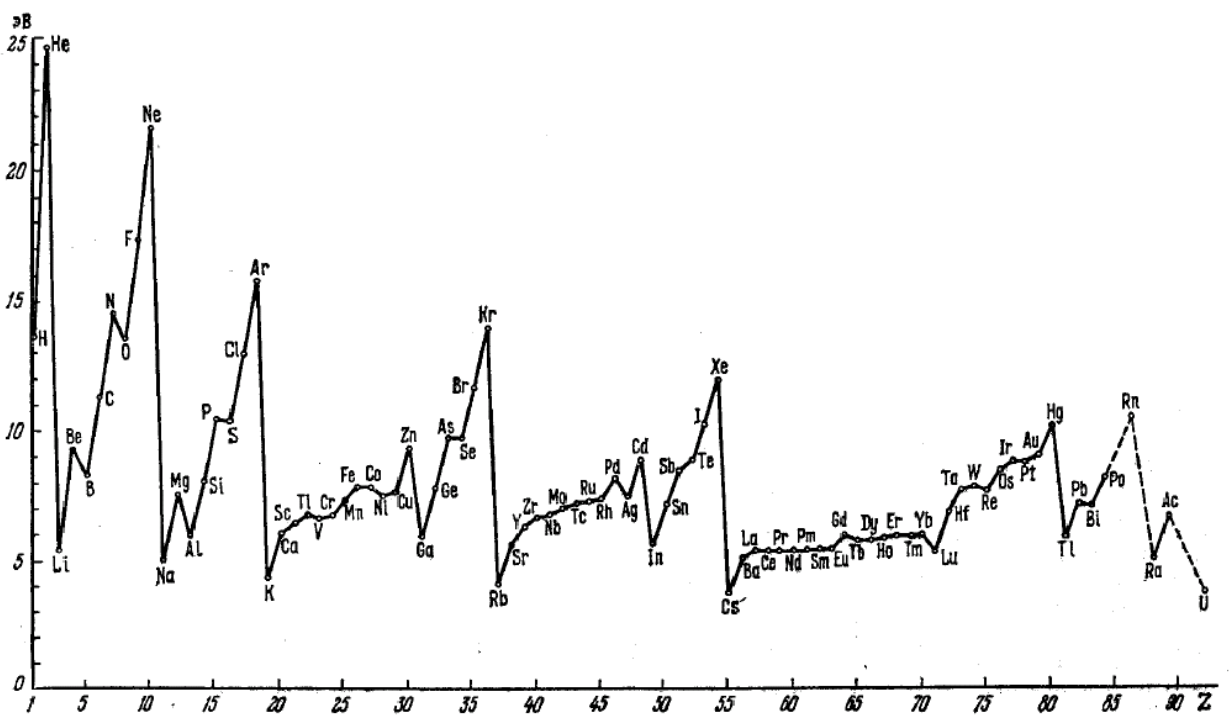


Рис. 24

соответствует двум первым (малым) периодам периодической системы, -содержащим по 8 элементов. Далее следуют два

больших периода по 18 элементов и большой период, включающий редкоземельные элементы и содержащий всего 32 элемента. Последняя группа состояний не заполняется полностью в существующих в природе (и искусственных трансураниевых) элементах. Для понимания хода изменения свойств элементов при заполнении состояний каждой группы существенна следующая особенность d - и f -состояний, отличающая их от состояний s и p . Кривые эффективной потенциальной энергии центрально-симметричного поля (складывающегося из электростатического поля и центробежного поля) для электрона в тяжелом атоме после быстрого, почти вертикального, спадания вблизи начала координат имеют глубокий минимум, вслед за чем начинают подниматься, асимптотически приближаясь к нулю. Для s - и p -состояний эти кривые идут в своей возрастающей части очень близко друг к другу. Это значит, что в этих состояниях электрон находится примерно на одинаковых расстояниях от ядра. Кривые же для d - и, в особенности, для f -состояний проходят значительно левее; ограничиваемая ими классически доступная область заканчивается значительно ближе, чем в s - и p -состояниях при той же полной энергии электрона. Другими словами, в d - и f -состояниях электрон находится в основном значительно ближе к ядру, чем в s - и p -состояниях. Ряд свойств атомов (в том числе химические свойства элементов — см. § 81) зависит главным образом от внешних областей Электронных оболочек. В этой связи весьма существенна описанная особенность d - и f -состояний. Так, при заполнении состояний $4f$ (g редкоземельных элементов — см. ниже) добавляемые электроны располагаются значительно ближе к ядру, чем электроны в ранее заполнившихся состояниях. В результате эти электроны почти не сказываются на химических свойствах, и все редкоземельные элементы оказываются химически очень сходными. Элементы, содержащие заполненные d - и f -оболочки (или не содержащие их вовсе), называют элементами *главных групп'*, элементы же, в которых как раз происходит заполнение этих со-

стояний, называют элементами *промежуточных групп*. Элементы этих групп удобно рассматривать отдельно.

Опишем элементы главных групп. с элементов главных групп. Водород и гелий обладают нормальными

состояниями: ${}^1_1\text{H} : 1s^2S_{1/2}, \dots, {}^2_2\text{He} : 1s^2S_0$ (индекс слева у химического символа обозначает везде атомный номер). Электронные конфигурации остальных элементов главных групп представлены в таблице

Таблица 3 конфигурации элементов главных групп

	s	s ²	s ² p	s ² p ²	s ² p ³	s ² p ⁴	s ² p ⁵	s ² p ⁶	
n = 2	₃ Li	₄ Be	₅ B	₆ C	₇ N	₈ O	₉ F	₁₀ Ne	1s ²
3	₁₁ Na	₁₂ Mg	₁₃ Al	₁₄ Si	₁₅ P	₁₆ S	₁₇ Cl	₁₈ Ar	2s ² 2p ⁶
4	₁₉ K	₂₀ Ca							3s ² 3p ⁶
4	₂₉ Cu	₃₀ Zn	₃₁ Ga	₃₂ Ge	₃₃ As	₃₄ Se	₃₅ Br	₃₆ Kr	3d ¹⁰
5	₃₇ Rb	₃₈ Sr							4s ² 4p ⁶
5	₄₇ Ag	₄₈ Cd	₄₉ In	₅₀ Sn	₅₁ Sb	₅₂ Te	₅₃ I	₅₄ Xe	4d ¹⁰
6	₅₅ Cs	₅₆ Ba							5s ² 5p ⁶
6	₇₉ Au	₈₀ Hg	₈₁ Tl	₈₂ Pb	₈₃ Bi	₈₄ Po	₈₅ At	₈₆ Rn	4f ¹⁴ 5d ¹⁰
7	₈₇ Fr	₈₈ Ra							6s ² 6p ⁶
	² S _{1/2}	¹ S ₀	² P _{1/2}	³ P ₀	⁴ S _{3/2}	³ P ₂	² P _{3/2}	¹ S ₀	

В каждом атоме полностью заполнены оболочки, указанные справа от таблицы в той же и во всех более высоких строчках. Электронная конфигурация в заполняющихся оболочках указана сверху, причем главное квантовое число электронов в этих состояниях указано цифрой, стоящей слева от таблицы в той же строчке. Снизу указаны нормальные состояния атома в целом. Так, атом Al имеет электронную конфигурацию $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$. Значения L и S в нормальном состоянии атома могут быть определены (при известной электронной конфигурации) с помощью правила Хунда (§ 67), а значение J определяется правилом, указанным в § 72.

Атомы благородных газов (He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn) занимают в таблице особое положение — в каждом из них заканчивается заполнение перечисленных в (73,1) групп состояний. Их элек-

тронные конфигурации обладают особой устойчивостью (потенциалы ионизации — наибольшие в соответствующих рядах). С этим связана и химическая инертность этих элементов.

Заполнение происходит в ряду элементов главных групп очень закономерно — заполняются сначала S-, а затем P-состояния каждого главного квантового числа n . Также закономерны электронные конфигурации ионов этих элементов (до тех пор, пока при ионизации не затрагиваются электроны d - и f -оболочек) — каждый ион имеет конфигурацию, соответствующую предыдущему атому.

Метод Томаса Ферми $Z = 0.155(2l + 1)^3$ Эта формула определяет значения Z , при которых в атоме впервые появляются электроны с данным l (с погрешностью около 10 %). Совсем точные значения получаются, если вместо коэффициента 0,155 выбрать

0,17: $Z = 0.177(2l + 1)^3$

42 Квазікласичне наближення (Метод ВКБ). Одномірний та багатомірний випадки.

Граничні умови та критерії справедливості методу ВКБ. Правило квантування Бора-Зоммерфельда.

!! Позначення : \hbar – насправді це \hbar з горизонтальною палочкою; $\bar{\nabla}$ - оператор Набла (перевернутий трикутник)

Метод. За деяких умов (умови розглянуто нижче) можна вирішувати рівняння Шредінгера класичними методами, тобто шукана хвильова функція просто виражається через класичні величини

Нехай маємо рівняння Шредінгера
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V\right)\psi = E\psi \quad (1).$$

Шукаємо його розв'язок у вигляді
$$\psi = \exp\left\{i \frac{S(r)}{\hbar}\right\} \quad (2),$$
 де $S(r)$ –

ейконал. Тоді
$$\bar{\nabla}\psi = \frac{i\bar{\nabla}S}{\hbar} e^{\frac{iS}{\hbar}} \Rightarrow$$

$$\Delta\psi = -\frac{(\bar{\nabla}S)^2}{\hbar^2} e^{\frac{iS}{\hbar}} + \frac{i\Delta S}{\hbar} e^{\frac{iS}{\hbar}} \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(-\frac{(\bar{\nabla}S)^2}{\hbar^2} + \frac{i\Delta S}{\hbar}\right) = (E - V)$$

(3). Фактично \hbar мале,

тому можна знехтувати другим членом рівності з правої сторони і в

результаті з (3) отримуємо : $(\bar{\nabla}S)^2 = 2\mu(E - V)$ - рівняння

Гамільтона-Якобі. (але це не важливо) S будемо шукати у вигляді:

$$S = S_0 + \frac{\hbar}{i} S_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_2 + \dots \quad (4).$$
 Підставляємо (4) у (3):

$$\frac{1}{2\mu} \left[\left(S_0' + \frac{\hbar}{i} S_1' + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_2' + \dots \right)^2 - \hbar \left(S_0'' + \frac{\hbar}{i} S_1'' + \dots \right) \right] = E - V$$

Обмежимося першими степенями по \hbar :

$$\frac{1}{2\mu} [(S'_0)^2 + \frac{2\hbar}{i} S'_0 S'_1 + o_1(\hbar^2)] - \frac{i\hbar}{2\mu} S''_0 + o_2(\hbar^2) = E - V$$

1)

$$\hbar^0: \frac{1}{2\mu} \left(\frac{dS_0}{dx}\right)^2 = (E - V(x)) \Rightarrow \frac{dS_0}{dx} = \pm \sqrt{2\mu(E - V(x))} = \pm p(x) \Rightarrow S_0 = \pm \int p(x) dx;$$

2)

$$\hbar^1: -i \frac{S'_0 S'_1}{\mu} - i \frac{S''_0}{2\mu} = 0$$

$$\Rightarrow S'_1 = -\frac{S''_0}{2S'_0} = -\frac{1}{2} \frac{d}{dx} \ln\left(\frac{dS_0}{dx}\right) = -\frac{1}{2} \frac{d}{dx} \ln(\pm p(x)) =$$

$$-\frac{1}{2} \frac{d}{dx} [\ln(\pm 1) + \ln(p(x))] = -\frac{1}{2} \frac{d}{dx} \ln(p(x)) \Rightarrow$$

$$S_1 = -\frac{1}{2} \ln(p(x)) + \ln C$$

Отримавши значення S_0 та S_1 повернемося до рівності (2).

Запишемо шукану хвильову функцію:

$$\psi = \exp\left[i \frac{S}{\hbar}\right] = C \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \exp\left[\pm \frac{i}{\hbar} \int p(x) dx\right]$$

Або остаточно

$$\psi = \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx\right] + \frac{B}{\sqrt{p(x)}} \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx\right] \quad (5)$$

Критерії можливості використання ВКБ :

Умова квазікласичності $|S'_0|^2 \gg h |S''_0| \Rightarrow |p(x)|^2 \gg h \frac{dp(x)}{dx}$, де

$$p(x) = \sqrt{2\mu(E - V)} = \hbar k(x) = \hbar \frac{2\pi}{\lambda}$$

Тоді дану умову можна

переписати наступним чином:

$$1 \gg h \left| \frac{dp(x)/dx}{p^2(x)} \right| = h \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{p(x)} \right) = h \frac{d}{dx} \frac{\lambda(x)}{2\pi\hbar} \Rightarrow 1 \gg \frac{1}{2\pi} \frac{d\lambda(x)}{dx}$$

Тобто

$$\frac{d\lambda(x)}{dx} \ll 2\pi$$

- перша інтерпретація умови квазікласичності. Але на цьому ми не зупинимось.

З іншого боку в умові $1 \gg h \frac{d}{dx} \frac{1}{p(x)}$ $p(x)$ можна виразити через

$$\text{енергії: } h \frac{d}{dx} \frac{1}{p(x)} = h \frac{d}{dx} \frac{1}{\sqrt{2\mu(E - V(x))}} = \frac{(dV/dx)\hbar\mu}{(2\mu(E - V(x)))^{3/2}} = \hbar\mu \frac{dV/dx}{[p(x)]^3} \ll 1$$

Тепер робимо невеличкі висновки з того що отримали (самий останній вираз): Потенціал $V(x)$ має змінюватись досить повільно, і частинка повинна мати ненульовий імпульс.

Повернемося до розгляду отриманої хвильової функції.

Особливої уваги потребує розгляд так званих точок повороту (там де $E=V(x_1)$). В цих точках кінетична енергія та імпульс частинки стають рівними 0 (тобто квазіклас. наближення не працює).

Тим більше, в області "під потенційним бар'єром" ($E < V$) імпульс стає комплексним (див. вираз для імпульсу через енергії) – що не можливо з клас точки зору.

При цьому другий член (5) буде нескінченно зростати, а фізичний зміст мають лише, як відомо, обмежені хвильові функції \rightarrow тому $V=0$. Постає питання як пов'язати клас. і неклас. розв'язки.

Це роблять так: в околі точки x_1 наш потенціал розкладають у степеневий ряд (Тейлора): $V(x) = V(x_1) + dV/dx (x-x_1) + \dots$ і отриманий ряд підставляють у вихідне рівняння Шредінгера:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi}{dx^2} = (E - V(x)) - \left. \frac{\partial V}{\partial x} \right|_{x_1} (x - x_1) \psi \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \left. \frac{\partial V}{\partial x} \right|_{x_1} (x - x_1) \psi = 0$$

- це є рівняння Ейрі. $\psi \equiv E(x)$ - функції Ейрі.

А потім на границях проблемної області зливаємо розв'язки через функції Ейрі.

Перейдемо до конкретного випадку. Нехай наша частинка рухається між двома точками повороту: $b < x < a$. Тобто $E < V$ коли $x > a$ та $x < b$.

Тоді маємо

$$\psi(x < b) = \frac{c_1}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(-\int_x^b \frac{|p(x)|}{\hbar} dx\right) \quad (a)$$

$$\psi(x > b) = \frac{c}{\sqrt{p(x)}} \sin\left[\left(\frac{i}{\hbar} \int_b^x p(x) dx\right) + \frac{\pi}{4}\right] \quad (б)$$

$$\psi(x < a) = \frac{c}{\sqrt{p(x)}} \sin\left[\left(\frac{i}{\hbar} \int_x^a p(x) dx\right) + \frac{\pi}{4}\right] \quad (в)$$

$$\psi(x > a) = \frac{c_2}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(-\int_a^x \frac{|p(x)|}{\hbar} dx\right) \quad (г)$$

Ясно що розв'язки (б) та (в) в області $a < x < b$ мають співпадати. Це

можливо лише за умови $\frac{1}{\hbar} \int_b^a p(x) dx + \frac{\pi}{2} = (n + 1)\pi, n - \text{цїле}$.

Якщо розповсюдити даний інтеграл по всьому шляху частинки від a

до b і в обернену сторону, отримаємо $\oint p(x) dx = (n + 1/2)2\pi\hbar$ -
умова квантування.

43 ПРЯМИЙ ВАРІАЦІЙНИЙ МЕТОД РІТЦА РОЗВ'ЯЗКУ ЗАДАЧ.

В ряді випадків наближене обчислення перших дискретних станів системи може бути проведене за допомогою варіаційного методу Рітца.

Нехай маємо систему що описується оператором Гамільтона.

$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$ (1) - частіше це рівняння точно не розв'язується. Тому намагаємось розв'язати його наближено. Метод розв'язку полягає в послідовному використанні операцій:

1). Знаходиться енергія основного рівня системи.

$$E_0 = \min \int \phi^*(x) \hat{H}(x) \phi(x) dx \quad . \text{(Щойно написаний інтеграл це } I_0 \text{ ,}$$

а $\phi(x)$ - довільна функція, що задовольняє умову 1а) ◀ Доведемо

це. $\int |\phi(x)|^2 dx = 1$ (1а). Розкладемо функцію по набору власних

функцій $\hat{H} : \phi(x) = \sum_{n=0} c_n \psi_n(x)$.

$$I_0 = \int \phi^*(x) \hat{H} \phi(x) dx = \sum_{n=0} \sum_{m=0} c_n^* c_m \int \psi_n^* \hat{H} \psi_m dx = \quad | \text{Зважаючи}$$

на (1) | $= \sum_{n=0} \sum_{m=0} E_n c_n^* c_m \int \psi_n^* \psi_m dx = \quad | \text{Врахувавши } \psi_n^* \psi_m = \delta_{nm} \quad |$

$$= \sum_{n=0} E_n |c_n|^2 \geq \sum_{n=0} E_0 |c_n|^2 = E_0 \sum_{n=0} |c_n|^2 = E_0 \quad \left(\text{Так як } \sum_{n=0} |c_n|^2 = 1 \right) . \text{ При}$$

цьому $E_0 \leq E_1 \leq E_2 \leq \dots$. З цього випливає $E_0 \leq \min I_0$. Отриману формулу обвести квадратиком, типу що це важливий результат. ▶

Таким чином обчислення енергії основного стану квантового

осцилятора зводиться до обчислення мінімуму I_0 . Для цього

береться пробна функція – це функція яка мінімізує значення I_0 :

$$\phi(x, \alpha, \beta, \dots), \text{ тоді } I_0(\alpha, \beta, \dots) = \int \phi^*(x, \alpha, \beta, \dots) \hat{H}(x) \phi(x, \alpha, \beta, \dots) dx$$

Розв'язуючи систему рівнянь $\frac{\partial I_0}{\partial \alpha} = \frac{\partial I_0}{\partial \beta} = \dots = 0 \Rightarrow \alpha_{opt}, \beta_{opt}$

знаходимо оптимальні значення параметрів, що мінімізують функцію I_0 .

$$I_0(\alpha_{opt}, \beta_{opt}, \dots) \approx E_0; \quad \phi(x, \alpha_{opt}, \beta_{opt}, \dots) \approx \psi_0$$

- функція

основного стану.

2) Енергія збуджених станів знаходиться подібним чином.

$$E_1 = \min \int \aleph^*(x) \hat{H} \aleph(x) dx \quad (\text{Щойно написаний інтеграл це } I_1)$$

Тут пробна функція \aleph повинна задовольняти наступним двом

умовам: $\int |\aleph(x)|^2 dx = 1; \quad \int \aleph^*(x) \phi(x) dx = 0$, тому що функції

ϕ та \aleph ортогональні. Щоб це довести знову розкладемо пробну функцію по власним функціям оператора

$$\aleph(x) = \sum_{n=1} c_n \psi_n(x)$$

Н: , зауважимо, що тут у нас сума від одиниці,

тому що функція \aleph ортогональна до основного стану, тому в сумі

$$I_1 = \sum_{n=1} \sum_{m=1} c_n^* c_m \int \psi_n^* \hat{H} \psi_m dx =$$

не буде доданку з $n=0$. (Знову

$$= \sum_{n=1} E_n |c_n|^2 \geq E_1 \sum_{n=1} |c_n|^2 = E_1$$

згадали співвідношення 1) . Отже

$$E_1 = \min I_1, \text{ це треба обвести в рамочку.}$$

$$\aleph(x, \gamma, \delta, \dots) \Rightarrow I_1(x, \gamma, \delta, \dots) \Rightarrow \frac{\partial I_1}{\partial \gamma} = \frac{\partial I_1}{\partial \delta} = \dots = 0$$

, тобто подібно до

того, як ми робили це вище, з системи рівностей знову знаходимо

$$E_1 \approx I_1(\delta_{opt}, \gamma_{opt}, \dots),$$

оптимальні значення дельти та гами.

$$\psi_1 \approx \chi_1(\delta_{opt}, \gamma_{opt}, \dots)$$

$$3) E_n = \min \int \psi_n^*(x) \hat{H} \psi_n(x) dx ; \int |\phi(x)|^2 dx = 1$$

$$\int \psi^* \phi dx = \int \psi \chi dx = \dots = \int \psi^*(x) R(x) dx = 0 ; R(x) \approx \psi_{n-1}$$

Особливість методу полягає в тому, що якщо взяти функцію в 30% похибки, то енергія буде лише в 3% похибки, тобто похибка пробної функції в першому порядку дає похибку в енергії в другому порядку! Тобто система сама себе регулює.

А тепер рассмотрим примеры: Задача. Знайдемо варіаційним методом енергію основного стану гармонічного осцилятора. |

$$U = \frac{\mu \omega^2 x^2}{2} ; \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{\mu \omega^2 x^2}{2} ;$$

$$I_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x) \hat{H} \phi(x) dx ; \text{Візьмемо}$$

$$\phi(x) = A \exp\left(-\frac{\alpha x^2}{2}\right) ; \int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(x)|^2 dx = 1 ;$$

$$A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2x^2} dx = A^2 \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = 1 \quad ; \quad \alpha > 0 \quad . \quad A = \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/4} ;$$

$$\phi(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{\alpha x^2}{2} \right) \quad (2)$$

$$I_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{\alpha x^2}{2} \right) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{\mu \omega^2 x^2}{2} \right) \exp\left(-\frac{\alpha x^2}{2} \right) dx \Rightarrow$$

$$\left| \frac{d^2}{dx^2} \exp\left(-\frac{\alpha x^2}{2} \right) = \left(-\frac{\alpha}{2} \exp\left(-\frac{\alpha x^2}{2} \right) 2x \right)' = \right.$$

$$\left. -\alpha \left(-\alpha x^2 \exp\left(-\frac{\alpha x^2}{2} \right) + \exp\left(-\frac{\alpha x^2}{2} \right) \right) \right)$$

$$\Rightarrow \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{\alpha x^2}{2} \right) \left[\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(-\alpha + \alpha^2 x^2 \right) + \frac{\mu \omega^2 x^2}{2} \right] \exp\left(-\frac{\alpha x^2}{2} \right) dx =$$

$$= \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \left\{ \frac{\hbar^2}{2\mu} \alpha \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx + \left(-\frac{\alpha \hbar^2}{2\mu} + \frac{\mu \omega^2}{2} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx \right\} =$$

$$= \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \left\{ \frac{\alpha \hbar^2}{2\mu} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} + \left(\frac{\mu \omega^2}{2} - \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2\mu} \right) \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^2 \alpha}} \right\} \Rightarrow$$

$$\left| \int x^2 e^{-\alpha x^2} dx = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \int e^{-\alpha x^2} dx = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = \frac{1}{\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}} \right|$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar^2 \alpha}{2\mu} \left(1 - \frac{1}{2}\right) + \frac{\mu \omega^2}{4\alpha} = \frac{\hbar^2 \alpha}{4\mu} + \frac{\mu \omega^2}{4\alpha} ;$$

$$I_0 = \frac{\hbar^2 \alpha}{4\mu} + \frac{\mu \omega^2}{4\alpha} ; \quad \frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{\hbar^2 \alpha}{4\mu} + \frac{\mu \omega^2}{4\alpha} \right) = 0 ;$$

$$\alpha^2 = \frac{\mu^2 \omega^2}{\hbar^2} ; \quad \alpha_{opt} = \frac{\mu \omega}{\hbar} \quad (3)$$

$$E_0 = I_0(\alpha_{opt}) = \frac{\hbar \omega}{2} . \text{ Результат обвести квадратиком.}$$

А если в выражение (2) для $\phi(x)$ подставить (3) то получится $\phi(x) \equiv \psi_0(x)$.

Информация для общего развития. Для ответа на вопрос она не нада, но в конспекте она есть, так что:

Ортогональною до парної буде довільна непарна функція

$$\aleph(x) = Bx e^{-\beta x^2/2} .$$

№ 44 Теорія збурень як метод наближеного розв'язку задач квантової механіки.

Всё началось с того, что точное решение уравнения Шредингера может быть найдено лишь в сравнительно небольшом числе простейших случаев. Часто в условиях задачи фигурируют величины разного порядка; среди них могут оказаться малые величины, после пренебрежения, которыми задача упрощается настолько, что делается возможным её точное решение. В таком случае первый шаг в решении поставленной задачи – точное её решение, а второй – в приближённом вычислении поправок, обусловленных малыми членами, отброшенными в упрощённой задаче. Общий метод для вычисления этих поправок наз. Теорией

Возмущений. Хай $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, де \hat{V} - малая поправка

(возмущение) к «невозмущённому» оператору \hat{H}_0 . Задача теории збурень для дискретного спектра может быть

сформулирована так: Предполагается, что собственные $\psi_n^{(0)}$ и собственные значения $E_n^{(0)}$ дискретного спектра

невозмущённого оператора \hat{H}_0 известны, т.е. известны точные

решения уравнения $\hat{H}_0 \psi^{(0)} = E^{(0)} \psi^{(0)}$ Требуется найти

приближённые решения уравнения $\hat{H} \psi = (\hat{H}_0 + \hat{V}) \psi = E \psi$ (*) т.е.

приближённые выражения для собственных ψ_n и значений

E_n возмущенного оператора. \hat{H} Будем считать, что все

собственные значения \hat{H}_0 не вырождены, имеется только дискретный спектр уровней энергии. Хай можно зроби́ти розклад,

$$\psi = \sum_m c_m \psi_m^{(0)} \quad \text{и подставим в (*)} = \sum_m c_m (E_m^{(0)} + \hat{V}) \psi_m^{(0)} = \sum_m c_m E \psi_n^{(0)}$$

(2). Умножим (2) на $\psi_k^{(0)*}$, и интегрируя, найдём

$$(E - E_k^{(0)}) c_k = \sum_m V_{km} c_m, \quad \text{тут } V_{km} \text{ - матрица оператора}$$

возмущений \hat{V} , определённая с помощью невозмущённых $\psi^{(0)}$ - ий

$$\psi_m^{(0)} : V_{km} = \int \psi_k^{(0)*} \hat{V} \psi_m^{(0)} dq. \quad \text{Будем искать } c_m \text{ и } E \text{ так:}$$

$$E = E^{(0)} + E^{(1)} + E^{(2)} + \dots \quad c_m = c_m^{(0)} + c_m^{(1)} + c_m^{(2)} + \dots, \quad \text{где}$$

величины $E^{(1)}$ и $c_m^{(1)}$ того же порядка малости, что и возмущение \hat{V} , величины $E^{(2)}$ и $c_m^{(2)}$ - второго порядка малости, и т.д. Найдём поправки к n-му собственному значению и

собственной функции $m \neq n \quad c_n^{(0)} = 1 \quad c_m^{(0)} = 0$. В первом

приближении $E = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} \quad c_k = c_k^{(0)} + c_k^{(1)}$

$$\text{а) } k = n \quad E_n^{(1)} = V_{nn} = \int \psi_n^{(0)*} \hat{V} \psi_n^{(0)} dq$$

б) $k \neq n \quad c_k^{(1)} = \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad c_n^{(1)} = 0$ (-чтобы $\psi_n = \psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)}$ была нормирована с точностью до членов первого порядка

включительно) $m \neq n \quad \psi_n^{(1)} = \sum_m \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)} \quad (\text{№}) \quad \psi_n^{(1)}$ ортогональна

к $\psi_n^{(0)}$, а поэтому \int от $|\psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)}|^2$ мало отличается от 1. Из (№)

следует условие применимости $|V_{mn}| \ll |E_n^{(0)} - E_m^{(0)}|$ Поправка на

второе приближение $E = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)}$ $c_k = c_k^{(0)} + c_k^{(1)} + c_k^{(2)}$

$$k = n \quad m \neq n \quad E_n^{(0)} c_n^{(0)} = \sum_m V_{nm} c_m^{(1)} \quad (\text{оператор } \hat{V} \text{ Эрмитов:}$$

$$V_{mn} = V_{nm}^*) \quad E_n^{(2)} = \sum_m \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (! \text{ Поправка второго приближения к}$$

энергии нормального состояния ВСЕГДА ОТРИЦАТЕЛЬНА). Для непрерывного спектра аналогично, только, что задание только энергии недостаточно для определения состояния. Вместо

$$(№) \quad \psi_n^{(1)} = \sum_m \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)} + \int \frac{V_{vn}}{E_n^{(0)} - E_v} \psi_m^{(0)} dv \quad (v-$$

совокупность значений величин, достаточных для определения состояния) /Для \forall физической величины F , с точностью до членов

1 порядка: $\psi_n = \psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)}$ легко получить

$$F_{nm} = F_{nm}^{(0)} + \sum_{k(k \neq n)} \frac{V_{nk} F_{km}^{(0)}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} + \sum_{k(k \neq m)} \frac{V_{km} F_{nk}^{(0)}}{E_m^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad . \text{ Критерием}$$

того, что наша теория работает, служит малость отношения

каждого следующего члена $\left| \frac{|V_{mn}|^2}{E_n - E_m} \right| \ll 1$, тогда ряд сходиться.

Теория не работает когда $E_n - E_m \Rightarrow 0$ (т.е. для згущенных уровней).

45 Стаціонарне збурення. Випадки відсутності та наявності виродження. Критерій застосування теорії збурень.

Для не вироджених рівнів – див. Попередній білет.

Для вироджених рівнів: Хай за відсутності збурення рівень $E_k^{(0)}$ є f -кратно виродженим (йому відповідають f різних хвильових

$\psi_{k1}^{(0)}, \psi_{k2}^{(0)}, \dots, \psi_{kf}^{(0)}$) потрібно знайти (E_k, ψ_k) тобто розв'язати р-ня $\hat{H}\psi_k = E_k\psi_k, \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \hat{V} \ll \hat{H}_0$. Хай $\psi_k = \sum_{i=1}^f a_i \psi_{ki}^{(0)}$

Підставимо це, доможемо на $\psi_{kj}^{(0)*}$ і про інтегруємо по координатам:

$$\sum_{i=1}^f a_i \int \psi_{kj}^{(0)*} \hat{H} \psi_{ki}^{(0)} d\tau = E_k \sum_{i=1}^f a_i \int \psi_{kj}^{(0)*} \psi_{ki}^{(0)} d\tau =$$

$$\sum_{i=1}^f (H_{ji} - E_k \delta_{ij}) a_i = 0 \quad (1) \quad j = 1, \dots, f \quad (1)\text{- це система}$$

$$(H_{11} - E_k) a_1 + H_{12} a_2 + \dots + H_{1f} a_f = 0$$

$$H_{21} a_1 + (H_{22} - E_k) a_2 + \dots + H_{2f} a_f = 0$$

.....

$$H_{f1} a_1 + H_{f2} a_2 + \dots + (H_{ff} - E_k) a_f = 0 \quad (2) \Rightarrow$$

$$\Delta(E_k) = \begin{vmatrix} H_{11} - E_k & H_{12} & \dots & H_{1f} \\ H_{21} & H_{22} - E_k & \dots & H_{2f} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ H_{f1} & H_{f2} & \dots & H_{ff} - E_k \end{vmatrix} = 0 \quad (3)$$

(3)- буде мати f коренів E_{k1}, \dots, E_{kf} , тобто під дією збурення

рівень $E_k^{(0)}$ розщеплюється на f підрівнів. Це явище наз.

Зняттям виродження, якщо деякі корені кратні(збігаються), то виродження знімається не повністю. Підставивши корінь E_{k1} в (2)

$$(H_{11} - E_{k1})a_1^{(1)} + H_{12}a_2^{(1)} + \dots + H_{1f}a_f^{(1)} = 0$$

$$H_{21}a_1^{(1)} + (H_{22} - E_{k1})a_2^{(1)} + \dots + H_{2f}a_f^{(1)} = 0$$

можна знайти невідомі $a_i^{(1)}$ \dots $H_{f1}a_1^{(1)} + H_{f2}a_2^{(1)} + \dots + (H_{ff} - E_{k1})a_f^{(1)} = 0$ тоді

вже можна знайти ψ_{k1} , яка відповідає E_{k1} : $\psi_{k1} = \sum_{i=1}^f a_i^{(1)} \psi_{ki}^{(0)}$. Для

кореня E_{k2} $\psi_{k2} = \sum_{i=1}^f a_i^{(2)} \psi_{ki}^{(0)}$, і т.д. Критерием того, що наша теорія працює, служить малість отношения кожного следующего

члена $\left| \frac{|V_{mn}|^2}{E_n - E_m} \right| \ll 1$, тогдa ряд сходиться. Теорія не працює

когда $E_n - E_m \Rightarrow 0$ (т.е. для згущеных уровней).

46 Квадратичний ефекти Штарка..

Ефекти Штарка. – розщеплення рівнів енергії та спектральних ліній, під дією постійного електричного поля. Для атома водню в полі з

напруженістю $\vec{\varepsilon}$ взаємодія його з ел. полем (|| OZ)

$\hat{V} = -\varepsilon d_z = e\varepsilon z$ ($\vec{d} = -e\vec{r}$ -ел. дипольний момент) Щоб знехтувати тонкою структурою вважаємо, що розщеплення, обумовлене ел. полем, перевищує розщеплення у тонкій структурі:

$e\varepsilon z \rangle \Delta E_{nj}, \varepsilon \rangle \frac{\Delta E_{nj}}{e\varepsilon z}$. Отже $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, де $\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$,

$\hat{V} \langle \hat{H}_0$. Розв'яжемо р-ня Шредінгера $(\hat{H}_0 + \hat{V})\psi = E\psi$. Розв'язки цього р-ня в 0 наближенні $\psi^{(0)} = \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ $E^{(0)} = E_n^{(0)} = -\frac{13.6}{n^2}$.

Поправка до енергії E_n у 1-му наближенні

$$\Delta E_n = \int \psi^{(0)*} \hat{V} \psi^{(0)} d\tau = e\varepsilon \int \psi^{(0)*} z \psi^{(0)} dv \quad . \text{Хвильова}$$

f основного рівня енергії E_1 має вигляд $\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi r_1^3}} e^{-\frac{r}{r_1}}$,

($r_1 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ - радіус 1 Боровській орбити) тому

$$\Delta E_1 = \frac{e\varepsilon}{\pi r_1^3} \int e^{-\frac{2r}{r_1}} z dv = 0 \quad \left(\int = 0 \text{ в наслідок непарності}$$

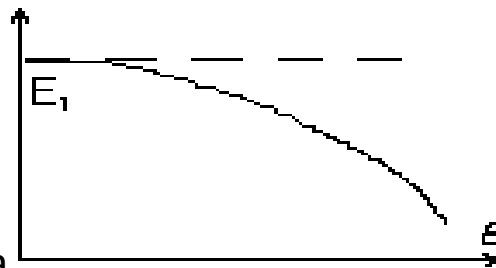
підінтегральної f , вона змінює знак при інверсії координат).

/Тому останній рівень енергії атому водню в ел. полі не

розщеплюється/ Отже $E = E_1 +$

$$\sum_{n=2}^{\infty} \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l \frac{\left| \int \psi_{nlm}^*(r, \theta, \varphi) (e\epsilon z) \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) dv \right|^2}{E_1 - E_n} =$$

$$E_1 - \epsilon^2 e^2 \sum_{n=2}^{\infty} \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l \frac{\left| \int \psi_{nlm}^*(r, \theta, \varphi) z \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) dv \right|^2}{|E_1 - E_n|} = E_1 - \alpha \epsilon^2 \quad \text{ВИЙШОВ}$$



квадратичний ефект Штарка

Лінійний ефект Штарка.

Це задача про еволюцію 1-го збудженого стану (ел. поле діє на 1-ий збуджений рівень) $n=2 \Rightarrow \{l=0, m=0; l=1, m=0, \pm 1\}$ $f=4$ - 4-кратно

вироджений рівень $\psi_1 = \psi_{200} = R_{20} Y_{00}$, $\psi_2 = \psi_{210} = R_{21} Y_{10}$,

$\psi_3 = \psi_{211} = R_{21} Y_{11}$, $\psi_4 = \psi_{21-1} = R_{21} Y_{1-1}$. Кожна з цих f

задовольняє р-ня Шредінгера у 0-наближенні $\hat{H}_0 \psi_i = E_2^{(0)} \psi_i$,

$$\psi = \sum_{k=1}^4 a_k \psi_k \quad (\hat{H}_0 + \hat{V})\psi = E\psi$$

$$E_2^{(0)} \sum_k a_k \psi_k + \sum_k a_k \hat{V} \psi_k = E \sum_k a_k \psi_k \quad (\text{доможемо}$$

на ψ_i^* і про інтегруємо по координатам) $\sum_{k=1}^4 (V_{ik} + \xi \delta_{ik}) a_k = 0 \quad (*)$,

де $\xi = E_2^{(0)} - E$ (**), $V_{ik} = \int \psi_i^* \hat{V} \psi_k dv$ -16 матричних елементів

оператора збурення $\hat{V} = e\epsilon z$ $z = r \cos\theta$ $dv = r^2 dr \sin\theta d\varphi$ тоді

$$V_{11} = e\epsilon \int \psi_1^* \hat{V} \psi_1 dv = \frac{e\epsilon}{32\pi r_1^3} \int_0^\infty \left(2 - \frac{r}{r_1}\right)^2 e^{-\frac{r}{r_1}} r^2 dr \int_0^\pi \cos\theta \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi = 0$$

(т.к. $\int_{\text{по } \theta} = 0$)

$$V_{12} = \frac{e\epsilon}{32\pi r_1^3} \int_0^\infty \left(2 - \frac{r}{r_1}\right)^2 e^{-\frac{r}{r_1}} r^2 dr \int_0^\pi \cos^2\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi = -3e\epsilon r_1$$

$\int_0^\infty x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$) Легко просчитати, що $V_{21} = V_{12}$ умова існування розв'язків системи (*) $\epsilon = 0$ визначника \Rightarrow

$$\begin{vmatrix} \epsilon & V_{12} & 0 & 0 \\ V_{21} & \epsilon & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \epsilon \end{vmatrix} = \epsilon^2 \begin{vmatrix} \epsilon & V_{12} \\ V_{21} & \epsilon \end{vmatrix} = \epsilon^2(\epsilon^2 - V_{12}^2) = 0$$

коренями цього р-ня є

$$\epsilon_1 = \epsilon_2 = 0 \quad \epsilon_3 = V_{12}$$

$\epsilon_4 = -V_{12}$ (3) тому згідно(**) рівень енергії $E_2^{(0)}$ в ел. полі розпадеться на 3 підрівні, 1 з яких 2-кратно вироджений

$$E_{21} = E_{22} = E_2^{(0)} \quad E_{23} = E_2^{(0)} + 3e\epsilon r_1 \quad E_{24} = E_2^{(0)} - 3e\epsilon r_1 \quad (4) \text{ (лінійний ефект$$

Штарка) Якщо хтось попросить в друг вас знайти хвильові f для (4), то все робити з системи (*), буде $\epsilon a_1 + V_{12} a_2 = 0$

$$V_{21} a_1 + \epsilon a_2 = 0 \quad \epsilon a_3 = 0 \quad \epsilon a_4 = 0 \quad \text{і підставляючи сюди по черзі}$$

значення ϵ з (3) отримаємо $\psi^{(1)} = a_3^{(1)} \psi_3 + a_4^{(1)} \psi_4$

$$\psi^{(2)} = a_3^{(2)} \psi_3 + a_4^{(2)} \psi_4 \quad \psi^{(3)} = a_1(\psi_1 - \psi_2) \quad \psi^{(4)} = a_3(\psi_1 + \psi_2), \text{ де}$$

$$a_1 = a_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

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

$$V_{mn} = \int \psi_m^0 V \psi_n^0 dx = \lambda \int \psi_m^0 x^3 \psi_n^0 dx = \lambda (x^3)_{mn} \quad \text{Енергія } k\text{-ого рівня}$$

збудження:

$$E_k = E_k^0 + \lambda V_{kk} + \lambda^2 \sum_{n \neq k} \frac{|V_{nk}|^2}{E_k^0 - E_n^0} + O(\lambda^3)$$

$$E_k = E_k^0 + \lambda (x^3)_{kk} + \lambda^2 \sum_{n \neq k} \frac{|(x^3)_{nk}|^2}{E_k^0 - E_n^0} \quad (*)$$

$$(x^3)_{kn} = \sum_l x_{kl} (x^2)_{ln} = \sum_l x_{kl} \sum_m x_{lm} x_{mn} = \sum_l \sum_m x_{kl} x_{lm} x_{mn}$$

$$x_{mn} = \int \psi_m^* x \psi_n dx \quad \psi_n(\xi) = \exp\{\xi^2 / 2\} H_n(\xi)$$

$$H_n(\xi) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi}} \exp\{\xi^2\} \frac{d^n \exp\{-\xi^2\}}{d\xi^n} \quad \text{- полином Чебишева-}$$

Ерміта n-ого порядку.

$$x_{mn} = x_0 \int_{-\infty}^{\infty} \exp\{-\xi^2\} H_m(\xi) \xi H_n(\xi) d\xi$$

$$x_0 = \sqrt{\hbar / \mu \omega_0}, \quad x_{mn} = x_0 (\sqrt{n/2} \delta_{n-1,m} + \sqrt{(n+1)/2} \delta_{n+1,m})$$

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

$$(x^3)_{kk} = 0 \quad (x^3)_{kn} = (x^3)_{nk} \quad \text{Підставляємо все в}$$

$$(*) E_k = \hbar\omega_0(k + 1/2) - \frac{\lambda^2}{\hbar\omega_0} \left(\frac{\hbar}{\mu\omega_0}\right)^3 \frac{15}{4} (k^2 + k) + \frac{11}{30} \quad k=0,1,2,.. \text{ Знайдемо}$$

умову застосування наближення: для великих k $V_{kn} \approx \lambda x_0^{3/2} k^{3/2}$

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

47 Нестационарне збурення.

Це збурення залежні від часу. $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{V})\psi$ Розв'яжемо методом варіації сталих

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{x}) e^{-i \frac{E_{\mathbf{k}}}{\hbar} t} \quad (1)$$

$$i\hbar \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\partial a_{\mathbf{k}}}{\partial t} - i a_{\mathbf{k}} \frac{E_{\mathbf{k}}}{\hbar} \right) \psi_{\mathbf{k}} e^{-i \frac{E_{\mathbf{k}}}{\hbar} t} =$$

$$\hat{H}_0 \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}} e^{-i \frac{E_{\mathbf{k}}}{\hbar} t} + \hat{V} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}} e^{-i \frac{E_{\mathbf{k}}}{\hbar} t}; \quad \hat{H}_0 \psi_{\mathbf{k}}^{(0)} = E_{\mathbf{k}}^{(0)} \psi_{\mathbf{k}}^{(0)}$$

$$i\hbar \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial a_{\mathbf{k}}}{\partial t} \psi_{\mathbf{k}}^{(0)} e^{-i \frac{E_{\mathbf{k}}^{(0)}}{\hbar} t} = \hat{V} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}^{(0)} e^{-i \frac{E_{\mathbf{k}}^{(0)}}{\hbar} t}$$

(допоможемо на $\psi_m^{(0)*}$ і про інтегруємо по координатам)

$$i\hbar \frac{da_m}{dt} = \sum_{\mathbf{k}} V_{m\mathbf{k}}(t) a_{\mathbf{k}}, \quad \text{де}$$

$$V_{m\mathbf{k}}(t) = \int \psi_m^{(0)*} \hat{V} \psi_{\mathbf{k}}^{(0)} d\mathbf{q} = V_{m\mathbf{k}} e^{i\omega_{m\mathbf{k}} t}$$

$$\omega_{m\mathbf{k}} = \frac{E_m^{(0)} - E_{\mathbf{k}}^{(0)}}{\hbar} \quad \text{- матричні елементи збурення (} |V_{m\mathbf{k}}| \ll 1 \text{)}$$

$$a_{\mathbf{k}} = a_{\mathbf{k}}^{(0)} + \lambda a_{\mathbf{k}}^{(1)} + \lambda^2 a_{\mathbf{k}}^{(2)} \quad \hat{V} = \lambda \hat{W} \quad V_{m\mathbf{k}} = \lambda W_{m\mathbf{k}} \quad |\lambda| \ll 1$$

$$i\hbar \left(\frac{\partial a_{\mathbf{k}}^{(0)}}{\partial t} + \lambda \frac{\partial a_{\mathbf{k}}^{(1)}}{\partial t} + \lambda^2 \frac{\partial a_{\mathbf{k}}^{(2)}}{\partial t} + \dots \right) = \lambda \sum_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}}^{(0)} + a_{\mathbf{k}}^{(1)} + a_{\mathbf{k}}^{(2)} + \dots) W_{m\mathbf{k}} e^{-i\omega_{m\mathbf{k}} t}$$

1) λ^0 : $i\hbar \frac{\partial a_k^{(0)}}{\partial t} = 0 \Rightarrow a_k^{(0)} = \text{const.}$ Фактично це початкова умова.

Нехай $\hat{V}(x, t) = \{V(x, t), 0 < t \leq T; 0, t \leq 0, t > T\}$.Хай $a_k(t \leq 0) = a_k^{(0)} = \delta_{ms}$

2) λ^1 : $i\hbar \frac{\partial a_k^{(1)}}{\partial t} = \sum_k a_k^{(0)} W_{mk} e^{-i\omega_{mk} t} = W_{ms} e^{-i\omega_{ms} t}$

$$a_m^{(1)} = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t W_{ms}(t') e^{-i\omega_{mk} t'} dt'$$

3) λ^2 : $i\hbar \frac{\partial a_k^{(2)}}{\partial t} = \sum_k a_k^{(1)} W_{mk} e^{-i\omega_{mk} t} =$

$$\sum_k \left(\frac{1}{i\hbar} \int_0^t W_{ms}(t') e^{-i\omega_{mk} t'} dt' \right) W_{mk} e^{-i\omega_{mk} t}$$

$$a_m^{(2)} = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \left(\sum_k \frac{1}{i\hbar} \int_0^{t'} W_{ms}(t'') e^{-i\omega_{mk} t''} dt'' \right) W_{mk}(t) e^{-i\omega_{mk} t} dt'$$

Отже $a_k = \delta_{ks} +$

$$\frac{1}{i\hbar} \int_0^t V_{ms}(t') e^{-i\omega_{ks} t'} dt' +$$

$$\frac{1}{i\hbar} \int_0^t \left(\sum_m \frac{1}{i\hbar} \int_0^{t'} V_{ms}(t'') e^{-i\omega_{ms} t''} dt'' \right) V_{mk}(t) e^{-i\omega_{km} t} dt' + \dots$$

Підставимо це в (1)

$$\psi(x, t) = \psi_s e^{-i\frac{E_s}{\hbar} t} + \sum_{k \neq s} \left(\frac{1}{i\hbar} \int_0^t V_{ks}(t') e^{-i\omega_{ks} t'} dt' \right) \psi_k(x) e^{-i\frac{E_k}{\hbar} t} + O(2, 3, \dots)$$

$t > 0$; якщо ж $t \leq 0$, то $\psi = \psi_s e^{-i\frac{E_s}{\hbar} t}$. / (Якщо попросять) При дії

збурення виникає переміщення станів ймовірність переходу/ $w_{sk} = |a_k(t)|^2$.

48 Точний розв'язок рівняння Шредингера для дворівневої збуреної системи.

Непосередственно из уравнения Шредингера получаем

$$(E - E_k^{(0)})c_k = \sum_m V_{km}c_m, \quad E = E_k^{(0)} + E^{(1)} \quad E^{(1)}c_k^{(0)} = \sum_{m, m \neq k} V_{km}c_m^{(0)}, \quad \text{или}$$

$$\sum_m (V_{km} - E^{(1)}\delta_{km})c_m^{(0)} = 0 \quad (1). \text{ Эта система имеет решение при}$$

условии обращения в 0 определителя, составленного из

коэффициентов при неизвестных: $|V_{km} - E^{(1)}\delta_{km}| = 0$. Это уравнение 2

степени по $E^{(1)}$ и имеет, 2 различных вещественных корня.

Поэтому целесообразно искать решение в виде

$$\psi = c_1^{(0)}\varphi_1 + c_2^{(0)}\varphi_2 \quad (2). \quad \begin{vmatrix} V_{11} - E^{(1)} & V_{21} \\ V_{12} & V_{22} - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

$$E_{1,2}^{(1)} = \frac{1}{2} [V_{11} + V_{22} \pm \sqrt{(V_{11} - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2}] \quad (3), \text{ пусть}$$

$$VV = \sqrt{(V_{11} - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2}. \text{ Подставим (3) в (1):}$$

$$c_1^{(0)} = \left\{ \frac{V_{12}}{2|V_{12}|} \left[1 \pm \frac{V_{11} - V_{22}}{VV} \right] \right\}^{1/2} \quad \text{и} \quad c_2^{(0)} = \pm \left\{ \frac{V_{21}}{2|V_{12}|} \left[1 \mp \frac{V_{11} - V_{22}}{VV} \right] \right\}^{1/2}$$

(*). Итого р-ня (2) с константами (3).

49 Частота та прецесія Рабі.

Частота Рабі вводиться при розв'язанні задачі об визначенні змінності n -ого і m -ого розв'язань рівняння Шредингера, при наявності періодичного возмущення. Її фізичний зміст, це періодичне змінні ймовірності знаходження системи в якій-то момент в якій-то стані. І так є у нас

періодичне возмущення типу $\hat{V} = \hat{F} e^{-i\omega t} + \hat{G} e^{i\omega t}$ (1). \hat{F} і \hat{G} -

оператори, не залежачі від часу. В силу ермитовості \hat{V}

повинно бути $\hat{F} e^{-i\omega t} + \hat{G} e^{i\omega t} = \hat{F}^+ e^{-i\omega t} + \hat{G}^+ e^{i\omega t}$, то єсть $\hat{G} = \hat{F}^+$

іли $G_{nm} = F_{mn}^*$. Тоді $V_{kn}(t) = V_{kn} e^{i\omega_{kn} t} =$

$$= F_{kn} e^{i(\omega_{kn} - \omega)t} + F_{kn}^* e^{i(\omega_{kn} + \omega)t} \quad E_m^{(0)} - E_n^{(0)} = \hbar(\omega + \varepsilon), \quad \varepsilon \text{ -малая}$$

величина. Из ур. Шредингера, для возмущення залежачого від часу (смотри билет нестационарне возмущення), можна

получити $i\hbar \frac{da_m}{dt} = \sum_k V_{mk}(t) a_k$ (3). Найбільш суттєвий ефект виникає від тих членів в суммах в правій частині (3), в яких залежність від часу визначається малою частотою

$\omega_{mn} - \omega$. Опускаючи всі інші члени, отримаємо систему з 2

рівнянь: $i\hbar \frac{da_m}{dt} = F_{mn} e^{i(\omega_{mn} - \omega)t} a_n = F_{mn} e^{i\varepsilon t} a_n$ і

$$i\hbar \frac{da_n}{dt} = F_{mn}^* e^{-i\varepsilon t} a_m. \text{ Ділаємо підстановку } a_n e^{i\varepsilon t} = b_n.$$

$$i\hbar \dot{a}_m = F_{mn} b_n \quad \text{і} \quad i\hbar (b_n - i\varepsilon b_n) = F_{mn}^* a_m. \text{ Виключаємо } a_m:$$

$$\ddot{b}_n - i\varepsilon \dot{b}_n + \frac{1}{\hbar^2} |F_{mn}|^2 b_n = 0. \text{ Введемо заміни (прямо як в курсі}$$

Колебаний и Волн) $\nu = \frac{F_{mn}}{\hbar}$ - частота Раби. В качестве 2

независимых решений выберем: $a_n = Ae^{i\alpha_1 t}$, $a_m = -A \frac{\hbar\alpha_1}{F_{mn}^*} e^{i\alpha_2 t}$

(4) и $a_n = Be^{-i\alpha_2 t}$, $a_m = B \frac{\hbar\alpha_2}{F_{mn}^*} e^{-i\alpha_1 t}$ (5) (A и B находятся из

условия нормировки). $\alpha_1 = -\frac{\varepsilon}{2} + \Omega$, $\alpha_2 = \frac{\varepsilon}{2} + \Omega$, $\Omega = \sqrt{\frac{\varepsilon^2}{4} + |V|^2}$ -

прецессия Раби. Таким образом, под влиянием возмущения,

$\Psi_n^{(0)}$, $\Psi_m^{(0)}$ перейдут в f $a_n \Psi_n^{(0)} + a_m \Psi_m^{(0)}$ с a_n, a_m из (4) или (5). Пусть в начальный момент времени ($t=0$) система находилась в

состоянии. $\Psi_m^{(0)}$ Состояние системы в последующие моменты времени определяется линейной комбинацией 2 полученных нами

f , обращаемой при $t=0$ в $\Psi_m^{(0)}$:

$$\Psi = (e^{i\varepsilon t/2} \cos \Omega t - \frac{i\varepsilon}{2\Omega} e^{-i\varepsilon t/2} \sin \Omega t) \Psi_m^{(0)} - \left(\frac{iV^*}{\Omega} e^{-i\varepsilon t/2} \sin \Omega t \right) \Psi_n^{(0)}$$

Квадрат модуля коэффициента при $\Psi_n^{(0)} = \frac{|V|^2}{2\Omega^2} (1 - \cos 2\Omega t)$

(6). Он определяет вероятность нахождения системы в момент

времени t в состоянии $\Psi_n^{(0)}$. Это периодическая f с частотой 2Ω , меняющейся в пределах от 0 до $|V|^2/\Omega^2$. При $\varepsilon=0$ (точный

резонанс) вероятность (6) будет $\frac{1}{2} (1 - \cos 2|V|t)$. Она

периодически меняется между 0 и 1; или что система

периодически из состояния $\Psi_m^{(0)}$ в состояние $\Psi_n^{(0)}$.

50 Ймовірність переходу під дією малого збурення. Випадок гармонійного збурення. (f -функція)

$$V(r, t) = U(r) \cos \omega t \quad 0 \leq t \leq T$$

$$W_{sk} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t U_{sk} \frac{1}{2} (e^{i\omega t'} + e^{-i\omega t'}) e^{-i\omega_{sk} t'} dt' \right|^2 =$$

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

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

$$\frac{1}{4\hbar^2} |U_{sk}|^2 \sum_{\pm} \frac{4 \sin^2(\frac{1}{2}(\omega_{sk} \pm \omega)t)}{(\omega_{sk} \pm \omega)^2} = \frac{1}{4\hbar^2} |U_{sk}|^2 \sum_{\pm} \left| \frac{\sin(\frac{1}{2}(\omega_{sk} \pm \omega)t)}{\frac{1}{2}(\omega_{sk} \pm \omega)} \right|^2$$

(так як $|e^{-ix} - 1|^2 = |e^{-ix} - 1| |e^{-ix} - 1| = 2(1 - \cos x) = 4 \sin^2 \frac{x}{2}$)

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

$$F(\omega_{sk} \pm \omega, t) = \pi t \delta\left(\frac{\omega_{sk} \pm \omega}{2}\right) = 2\pi t \delta(\omega_{sk} \pm \omega) \quad t) \left| \frac{2}{\omega_{sk} \pm \omega} \right| \text{ Тоді}$$

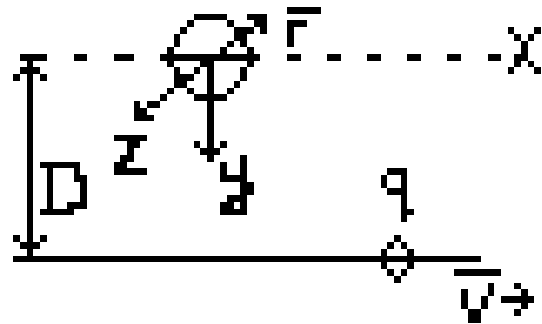
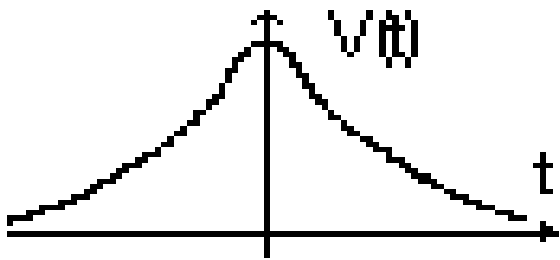
$$W_{sk} = \frac{1}{2\hbar^2} |U_{sk}|^2 \pi t \delta(\omega_{sk} \pm \omega) \approx t \quad \text{ймовірність переходу за 1 часу}$$

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

$E_k = E_s \pm \hbar \omega$ 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.

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



Будуть переходи електронів в атомі, при прольоті рядом важкої

частинки.
$$W_{12} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{t_0}^t V_{12}(t') e^{i\omega_{12}t'} dt' \right|^2 \quad (1) \text{ Нас цікавить } W_{12},$$

коли $t \rightarrow \infty$
$$W_{12} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} V_{12}(t') e^{i\omega_{12}t'} dt' \right|^2 \quad \text{Частинка рухається}$$

вздовж вісі X, в площині XOY D-прицільна відстань. Нехай при $t=0$ $\{R_x=0, R_y=D, R_z=0\}$ -координати частинки по відношенню до ядра. В

$\forall t \{R_x=vt, R_y=D, R_z=0\}$ Знайдемо енергію збурення

$$V = \frac{ze^2}{|\vec{R}-\vec{r}|} + \frac{ze^2}{|\vec{R}|} = \frac{ze^2}{\sqrt{(vt-x)^2 + (D-y)^2 + z^2}} - \frac{ze^2}{|\vec{R}|} \quad \text{вважаємо, що}$$

частинка пролітає поза атомом, координати електрона малі

величини.
$$= \frac{ze^2}{\sqrt{D^2 + v^2t^2}} \left(1 + \frac{Dx + vty}{D^2 + v^2t^2} + O(x^2 + y^2 + z^2) \right) - \frac{ze^2}{|\vec{R}|}$$

Матричні елементи
$$V_{12}(t) = \int \psi_1^*(\vec{r}) V(\vec{r}) \psi_2(\vec{r}) dV =$$

$$= \frac{ze^2}{\sqrt{D^2 + v^2 t^2}} \left\{ \int \psi_1^* \psi_2 dV + \frac{Dx_{12} + vty_{12}}{D^2 + v^2 t^2} \right\} - \frac{z ze^2}{|\vec{R}|} \int \psi_1^* \psi_2 dV$$

$$\int \psi_1^* \psi_2 dV = \delta_{12} \quad \psi_2 \rightarrow \psi_1 \Leftrightarrow V_{12} = \frac{ze^2}{(D^2 + v^2 t^2)^{3/2}} (Dx_{12} + vty_{12}) \quad , D/v=t_0$$

— час зіткнення. Тоді з (1)

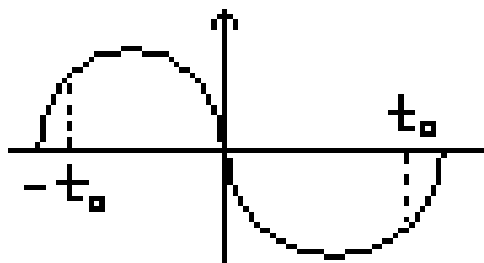
$$W_{12} = \frac{z^2 e^4}{\hbar^2 D^6} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \frac{Dx_{12} + vty_{12}}{(1 + (t/t_0)^2)^{3/2}} e^{i\omega_{12}t} dt \right|^2$$

$$J_1 = Dx_{12} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(1 + (t/t_0)^2)^{3/2}} e^{i\omega_{12}t} dt$$

$$J_2 = v y_{12} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{t}{(1 + (t/t_0)^2)^{3/2}} e^{i\omega_{12}t} dt \quad . \in 2 \text{ характеристикних}$$

часових значення. Візьмемо **1)** (Імпульсний режим) $t_0 \ll \frac{1}{\omega_{12}}$,

тоді $J_1 = \frac{Dx_{12}t}{\sqrt{1 + (t/t_0)^2}} = 2t_0 Dx_{12} = 2D^2 x_{12} / v \quad J_2 = 0 \quad W_{12} \approx \frac{z^2 e^4 4D^4 x_{12}^2}{\hbar^2 D^6 v^2}$

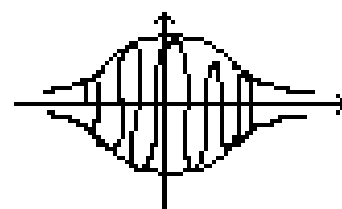


(непарна, антисиметрична f) $t_0 \ll \frac{1}{\omega_{12}}$ або

$$D\omega_{12} \ll v$$

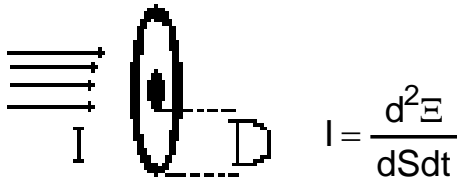
2) (Адіабатичний режим) $t_0 \gg \frac{1}{\omega_{12}}$, $J_1 \approx 0$ W_{12}

визначається через J_2 . Буде швидка осциляція. (високочастотне заповнення)



.(границя між 2 режимами $W_{12} \approx 0$ $D\omega_{12} \gg v$) Щоб відбулося кулонівське збудження need $D\omega_{12} \ll v$ (велике v енергетично не вигідно). При зменшенні D , зростає W_{12} , але обмежується

вибраним наближенням.



$$I = \frac{d^2E}{dSdt}$$

$$dp_{12} = \frac{dW_{12}}{dt} = W_{12}(D)2\pi D l dD = \frac{z^2 e^4 |x_{12}|^2 2\pi D l dD}{\hbar^2 v^2 D^2}$$

$$p_{12} = \frac{z^2 e^4 |x_{12}|^2 8\pi l}{\hbar^2 v^2} \int_a^{v/\omega_{12}} \frac{dD}{D} = \frac{z^2 e^4 |x_{12}|^2 8\pi l}{\hbar^2 v^2} \ln \frac{v}{a\omega_{12}}$$

. Якщо попросять дуже: $\Leftarrow F(v) = \frac{1}{v^2} \ln \frac{v}{a\omega_{12}}$ через $\frac{dF}{dv} = 0$

$$v_{opt} = \sqrt{e^1 a\omega_{12}}$$

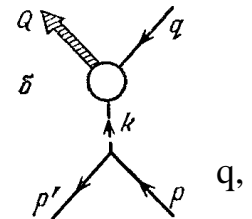
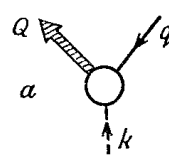
Метод псевдофотонів Вайцеккера.

Метод Вейцеккера-Вільямса.

Порівняємо два процеси, що описуються діаграмами.

Діаграма а) відображає зіткнення фотона

$k (k^2 = 0)$ з деякою частинкою з 4-імпульсом маси m . В результаті утворюється система з 4-імпульсом Q .



Діаграма б) – зіткнення такої самої частинки q з частинкою з 4-імпульсом p , маси M . В результаті остання частинка набуває імпульса p' і утворюється та сама система Q .

Останню систему можна розглядати, як зіткнення частинки q з віртуальним фотоном, випущеним частинкою p , імпульс якої рівний $k = p - p' (k^2 < 0)$. Якщо при цьому

$|k^2|$ мала величина, то віртуальний фотон мало відрізняється від реального. Така ситуація зустрічається при зіткненні швидких частинок. В таких умовах переріз процесу б) можна виразити через переріз процесу а), такий спосіб опису і називається методом Вейцеккера-Вільямса.

52 Взаємодія атома з електромагнітним полем довільної довжини хвилі.

Розглянемо поля: $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)=A_0\mathbf{e}_k\cos(\omega t -\mathbf{k}\mathbf{r})$ (Жирним виділені вектора)

/****/ де $|\mathbf{k}|=\omega/v=2\pi/\lambda$ – хвильовий вектор, направлений вздовж напрямку розповсюдження хвилі, $v=\lambda f$ – фазова швидкість. \mathbf{A} – вектор потенціал // \mathbf{E} та \mathbf{H} напруженість електричної та магнітної складової поля, \mathbf{e}_k – поляризація */***/

(между /****/ раздуплялово */***/ / либо не является обязательным)

$\mathbf{e}_k \perp \mathbf{k}$ $\mathbf{H}=[\nabla \mathbf{A}]=A_0[\mathbf{e}_k \mathbf{k}]\sin(\omega t -\mathbf{k}\mathbf{r})$ $\mathbf{E}=-1/c \partial \mathbf{A}/\partial t =A_0\mathbf{e}_k\omega/c \sin(\omega t -\mathbf{k}\mathbf{r})$ де $A_0=c/\omega \sqrt{2I}$ $\mathbf{E}_0=A_0\mathbf{e}_k\omega/c$

Інтенсивність чи вектор Умова-Пойнтінга: (здесь Высоцкий на лекции сделал ошибку не написал коэффициент $c/4\pi$.)

$$I = \langle |\vec{S}| \rangle_{T=\frac{2\pi}{\omega}} = \frac{c}{4\pi} \langle |\vec{E} \times \vec{H}| \rangle_T =$$

$$= \frac{c}{4\pi} A^2 |\vec{e}_k \times [\vec{e}_k \times \vec{k}]| \frac{\omega}{c} \langle \sin^2(\omega t - \vec{k}\vec{r}) \rangle_T =$$

$$= \frac{c}{4\pi} A_0^2 \frac{\omega k}{2c}, k = \frac{\omega}{c} \Rightarrow I = A_0^2 \frac{\omega^2}{2c^2} \frac{c}{4\pi}$$

(1a)

/****/ Повний оператор Гамільтона системи складається з суми

гамільтоніана поля
$$\hat{H}_{ph} = \sum_{k,\alpha} \hbar\omega_k (\hat{B}_{k,\alpha}^+ \hat{B}_{k,\alpha} + 1/2)$$

гамільтоніана атома
$$\hat{H}_a = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U$$
 та оператора взаємодії

електрона з полем. Тут \hat{p} – оператор імпульсу електрона, m – його маса (тов. Высоцкий сразу подставлял эффективную массу μ), U – потенціальна енергія взаємодії з ядром та іншими електронами. Як повинно бути відомим ☺ з класичної електродинаміки, “Вмикання

" електромагнітного поля з калібруванням $\varphi=0, \operatorname{div}\mathbf{A}=0$ здійснюється заміною імпульсу зарядженої частинки на $\mathbf{p}-e\mathbf{A}/c$, де e – заряд частинки. Відповідно до цього у квантовій механіці оператор імпульсу замінюємо: *****/

$$\hat{\mathbf{p}} = \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right) \Rightarrow \hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + U =$$

$$= \frac{\left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2}{2\mu} + U = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + \frac{e^2 \vec{A}^2}{2\mu c^2} + \frac{e\vec{A}\mathbf{p}}{\mu c} - \frac{i\hbar e}{\mu c} (\nabla \vec{A}) + U \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + U + \frac{e\vec{A}\hat{\mathbf{p}}}{\mu c} + \frac{e^2 \vec{A}^2}{2\mu c}$$

Тут использовано условие калибровки потенциалов

$(\nabla \vec{A}) = \operatorname{div} \vec{A} = 0$ /*Векторы потенциалы одного и того же ел-магн поля могут отличатся друг от друга поэтому для точного определения используется калибровка(это одна из возможных) */
 При возведении в квадрат операторов пишем сумму произведений первого на второй и второго на первый. Также явный вид оператора импульса

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$$

Можна розділити цей гамільтоніан на 3 різних (гамільтоніан атома без поля + сума операторів взаємодії атома з полем)

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + U, \rightarrow \hat{V}_1 = \frac{e\vec{A}\hat{\mathbf{p}}}{\mu c}, \rightarrow \hat{V}_2 = \frac{e^2 \vec{A}^2}{2\mu c} \Rightarrow \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_1 + \hat{V}_2; (1)$$

При малих полях квадратичним членом можна знехтувати. А при великих – лінійним. При дуже великих полях з'являється сильно упоряджений потенціал. На будь який заряд в дуже сильному полі діє сила, що виштовхує його з поля – кондеромоторні сили.

Визначимо коли $V_1=V_2$: (при цьому будемо вважати оператор імпульсу просто імпульсом)

$$\hat{V}_1(\vec{A}_{kr}) = \hat{V}_2(\vec{A}_{kr}) \Rightarrow A_{kr} = \frac{2pc}{e} \quad (2)$$

На Боровських орбітах (a – радіус Боровської орбіти)

$$a = \frac{\hbar^2}{\mu l^2} \rightarrow pa = n\hbar \rightarrow p = n \frac{\hbar}{a} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow A_{kr} = \frac{2n\hbar c}{ea} \Rightarrow A_{kr}(\min 4) = \frac{2\hbar c}{ea} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow E_{kr}(\min)44 = A_{kr}(\min) \frac{\omega}{c} = \frac{2\hbar\omega c}{eac}$$

Розглянемо оптичний діапазон: $\omega = 2 \cdot 10^{15}$ Гц (c^{-1}) тоді критична напруженість ел. поля:

$$E_{kr}(\min) = \frac{2 \cdot 10^{-27} * 2 \cdot 10^{15} * 2}{5 \cdot 10^{-10} * 10^{-8}} =$$

$$= 1.5 \cdot 10^6 \text{ SGSE} = 4.5 \cdot 10^8 \text{ B/cm}$$

Это очень большая величина ($E > E_{kr}$ только для лазеров в остальных же случаях $E \ll E_{kr}$) поэтому откинем квадратическое слагаемое в гамильтониане (1) \Rightarrow Збурення

$$\hat{V} = V_1 |_{E \ll E_{kr}} = \frac{e\vec{A}\hat{p}}{\mu c} \rightarrow \hat{H} =$$

$$= \hat{H}_0 + \hat{V}_1 \rightarrow \hat{H}_0 \psi_n = E_n \psi_n \quad (3)$$

Ймовірність переходу з m -го на s -й рівень при дії електромагнітного поля на протязі часу t :

$$W_{sm} = \left| \frac{1}{\hbar} \int_0^t V_{sm}(t') \exp(i\omega_{sm}t') dt' \right|^2 \quad (4)$$

Матричний елемент збурення: $V_{sm} = \int \psi_s^* V(\vec{r}, t) \psi_m dv$, де

$$V(\vec{r}, t) = \frac{e}{\mu c} \{ A_0 \vec{e}_k \cos(\omega t' - \vec{k}\vec{r}) \hat{p} \}, \text{ представимо } \cos \text{ в}$$

експотенціальному вигляді $\cos x = (e^{ix} + e^{-ix})/2$, з урахуванням всього вищесказаного отримуємо:

$$W_{sm} = \frac{e^2 A_0^2}{4\hbar^2 \mu^2 c^2} * \left| \int_0^t \exp(i(\omega + \omega_{sm})t') dt \int \psi_s^* e^{-i\vec{k}\vec{r}} (\vec{e}_k \cdot \vec{p}) \psi_m dv + \int_0^t \exp(i(\omega_{sm} - \omega)t') dt \int \psi_s^* e^{i\vec{k}\vec{r}} (\vec{e}_k \cdot \vec{p}) \psi_n dv \right|^2$$

(5)

В цій формулі якщо буде йти резонанс по першому доданку то другий неістотний і навпаки /**** (короче выживает сильнейший и только один) (это должно быть рассказано подробно в разделе кулоновского возбуждения атома заряженной частицей но в принципе попробую тоже кое как раздуплить ?????потом) ****/

$$W_{sm} = \frac{e^2 A_0^2}{4\hbar^2 \mu^2 c^2} * \left| \int_0^t \exp(i(\omega_{sm} \pm \omega)t') dt \right|^2 * \left| \int \psi_s^* e^{\mp i\vec{k}\vec{r}} (\vec{e}_k \cdot \vec{p}) \psi_n dv \right|^2 \quad \text{(6)}$$

Используя формулу $\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 \alpha t}{\pi t \alpha^2} = \delta(\alpha)$ и то что $\delta(x/2) = 2\delta(x)$ можно показать что:

$$\left| \int_0^t \exp(i(\omega_{sm} \pm \omega)t') dt \right|^2 = \pi t \delta\left(\frac{\omega_{sm} \pm \omega}{2}\right) = 2\pi t \delta(\omega_{sm} \pm \omega)$$

при $t \gg 1/\omega$ следовательно

$$W_{sm} = \frac{e^2 A_0^2 \pi t}{2\hbar^2 \mu^2 c^2} \delta(\omega_{sm} \pm \omega) * \left| \int \psi_s^* e^{\mp i\vec{k}\vec{r}} (\vec{e}_k \cdot \vec{p}) \psi_n dv \right|^2 \quad \text{(8)}$$

* (- знак умножения) . Обозначим $\int \psi_s^* e^{\mp i \vec{k} \vec{r}} (\vec{e}_k \hat{p}) \psi_n dv = B_{sm}$
 и выразив из (1a) A_0^2 получим окончательную формулу для
 вероятности перехода $m \rightarrow s$ за единицу времени: (I – это
 интенсивность)

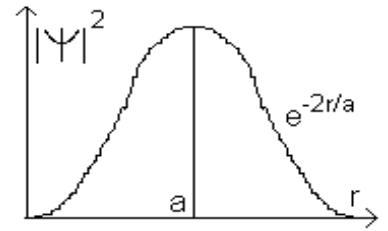
$$P_{sm} = \frac{W_{sm}}{t} = \frac{4\pi^2 e^2 I}{\hbar^2 \mu^2 \omega^2 c} |B_{sm}|^2 \delta(\omega_{sm} \pm \omega) \quad (9)$$

Надо отметить что эта формула применима лишь для
 ограниченных времен действия возмущения. При выведении
 использовалась формула (6) справедливая лишь для времен
 значительно меньших времени жизни состояния m (то есть
 начального состояния атома) (В следствии квантовых переходов из
 состояния m в другие состояния вероятность пребывания системы
 в состоянии m будут уменьшатся. Если это уменьшение происходит
 по закону $\exp(-t/T)$ то T – время жизни состояния m). Ограничивает
 также (7)

$$1/\omega \ll t \ll T \quad (9a)$$

53 Дипольне наближення при взаємодії електромагнітного випромінювання з атомними системами:

Если бы не было e^{ikr} в формулах для вероятности перехода (и не только в ней) то все было бы намного проще. Оценим величину показателя



$$e^{\mp ikr}; \rightarrow kr = \frac{2\pi r}{\lambda} \leq \frac{2\pi r_{\max}}{\lambda} \approx \frac{2\pi a}{\lambda} \quad (10)$$

Атом зосереджений біля Боровської орбіти (a)

1) $a \sim 1 \text{ \AA}$ (ангстрем) для зовнішніх оболонок $\lambda \sim 1 \mu$ - видимий діапазон

$$kr|_{\max} \sim \frac{2\pi * 10^{-8}}{10^{-4}} \approx 10^{-3} \ll 1 \quad (11)$$

2) $a \sim 0.1 \text{ \AA}$ внутрішня оболонка атома $\lambda \sim 1 \text{ \AA}$ $kr(\max) \sim 1$ лише для рентгенівського випромінювання.

Отже атом у більшості випадків погана приймальна антена
 e^{ikr} можна розкласти в ряд якщо $kr \ll 1$:

$$\exp(\mp ikr) = 1 \pm ikr + \dots \quad (12) \text{ Обмежимося першим наближенням}$$

саме $\exp(\mp ikr) = 1$ це і називають **дипольним наближенням**

(e^{ikr} заміняють на **const**). Тоді: $B_{sm} \Rightarrow \int \psi_s^* (\vec{e}_k \hat{p}) \psi_m dv \rightarrow [\vec{r}, \hat{H}_0] \sim \hat{p}$

$$\begin{aligned} [\vec{r}, \hat{H}_0] \psi &= (\vec{r} (-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + u) - (-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + u) \vec{r}) \psi = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \{ \vec{r} \Delta \psi - \nabla \nabla (\vec{r} \psi) \} = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \{ \vec{r} \Delta \psi - \nabla (\nabla \vec{r} \psi + \vec{r} \nabla \psi) \} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \{ \vec{r} \Delta \psi - (\nabla \vec{r}) (\nabla \psi) - \vec{r} \Delta \psi \} = \frac{\hbar^2}{\mu} \nabla \psi = \frac{i\hbar}{\mu} \hat{p} \psi \Rightarrow \hat{p} = -\frac{i\mu}{\hbar} [\vec{r}, \hat{H}_0] \end{aligned}$$

, ($\nabla r = 1$)

$$B_{sm} = -\frac{i\mu}{\hbar} \vec{e}_k \int \psi_s^* (\vec{r} \hat{H}_0 - \hat{H}_0 \vec{r}) \psi_m dv = -\frac{i\mu}{\hbar} \vec{e}_k \{ \int \psi_s^* \vec{r} \hat{H}_0 \psi_m dv - \int \psi_s^* \hat{H}_0 \vec{r} \psi_m dv \} =$$

(используем $\hat{H}_0 \psi_m = E_m \psi_m$)

$$= -\frac{i\mu}{\hbar} \vec{e}_k \{E_m \int \psi^* s \vec{r} \psi_m dv - E_s \int \psi^* s \vec{r} \psi_m dv\} = -\frac{i\mu}{\hbar} \vec{e}_k \int \psi^* s \vec{r} \psi_m dv (E_m - E_s) = i\mu \vec{e}_k \omega_{sm} \vec{r}_{sm}$$

(13) Где введено обозначение $\vec{r}_{sm} = \int \psi^* s \vec{r} \psi_m dv$ (14) и

использовано что частота $\omega_{sm} = (E_s - E_m) / \hbar$

Подставляем (13) в (9), тогда вероятность перехода за единицу времени:

$$P_{sm} = \frac{W_{sm}}{t} = \frac{4\pi^2 \mu^2 \omega_{sm}^2}{\hbar^2 \mu^2 \omega^2 c} |\vec{e}_k (e \vec{r}_{sm})|^2 \delta(\omega_{sm} \pm \omega) = \frac{4\pi^2 I}{\hbar^2 c} |\vec{e}_k \vec{d}_{sm}|^2 \delta(\omega_{sm} \pm \omega) \quad (14)$$

Где $d_{sm} = (e \vec{r}_{sm})$ называется дипольным электрическим моментом перехода.

Показує що ймовірність переходу пропорційна вектору дипольного наближення

$$P_{sm} \rightarrow \langle P_{sm} \rangle = \frac{4\pi^2 I}{\hbar c} \langle |\vec{d}_{sm}|^2 \cos^2 \theta \rangle \delta(\omega_{sm} \pm \omega) = \frac{4\pi^2 I}{3\hbar c} |\vec{d}_{sm}|^2 \delta(\omega_{sm} \pm \omega) \quad (15)$$

Найбільш використовується формула для ймовірності переходу між рівнями m і s під дією ел-магн випромінювання

Якщо переходи не вироджені ймовірність переходу і в верх і вниз буде однаковою. Якщо вироджені то:

$$P_{sm} = \sum_{\beta=1}^{f_m} \sum_{\alpha=1}^{f_s} \frac{1}{f_s} \left\{ \frac{4\pi^2 I}{3\hbar c} |d_{\alpha s, \beta m}|^2 \delta(\omega_{sm} - \omega) \right\} \quad f - \text{кратність}$$

виродження відповідного рівня

$$P_{ms} = \sum_{\beta=1}^{f_s} \sum_{\alpha=1}^{f_m} \frac{1}{f_m} \left\{ \frac{4\pi^2 I}{3\hbar c} |d_{\beta m, \alpha s}|^2 \delta(\omega_{sm} - \omega) \right\}$$

$$P_{sm} = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \frac{1}{f_s} D \rightarrow P_{ms} = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \frac{1}{f_m} D \Rightarrow P_{sm} = P_{ms} \frac{f_m}{f_s} \quad (16)$$

54 Правила відбору для дипольних переходів.

Условия, определяющее возможность испускания или поглощения дипольного электрического излучения, носят названия правил отбора дипольного электрического излучения.

Согласно (14) вероятность перехода пропорциональна квадрату проекции матричного элемента дипольного момента на

направление поляризации фотона : $P_{sm} \sim (\vec{e}_k \vec{d}_{sm}) = e(\vec{e}_k \vec{r}_{sm})$,
 $\vec{r} = \{x, y, z\}$, из (14) получаем

$$\vec{r}_{sn} = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi_{nlm}^*(r, \theta, \varphi) \vec{r} \psi_{n'l'm'}(r, \theta, \varphi) r^2 dr \sin\theta d\theta d\varphi \quad (17)$$

Волновая ф-я: $\psi_{nlm} = R_{nl}(r) P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi}$ (18)

Где n, l, m – квантовые числа; l, m, l', m' – определяют квадрат момента количества движения и его проекцию на ось z соответственно для конечного и начального состояний.

Далее рассмотрим случаи различных направлений единичного

вектора поляризации фотона \vec{e}_k , уравнение 3 системы (19) – вдоль оси z, а вместо рассмотрения двух других случаев (параллельно x и y) удобно рассмотреть две их линейные комбинации, соответствующие двум возможным круговым поляризациям фотонов (уравнения 1 и 2 системы (19)):

$$\begin{cases} \eta = x + iy = r \sin\theta(\cos\varphi + i \sin\varphi) = r \sin\theta e^{i\varphi} \\ \xi = x - iy = r \sin\theta e^{-i\varphi} \\ z = r \cos\theta \end{cases} \quad (19)$$

$$\eta_{nlm, n'l'm'} = \int_0^\infty R_{nl}(r) R_{n'l'}(r) r^3 dr \int_0^\pi P_l^m(\cos\theta) \sin\theta P_{l'}^{m'}(\cos\theta) \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} e^{-im\varphi} e^{i\varphi} e^{im'\varphi} d\varphi \Rightarrow$$

$$\int_0^{2\pi} e^{-im\varphi} e^{i\varphi} e^{im'\varphi} d\varphi = \int_0^{2\pi} e^{i(-m+l+m')\varphi} d\varphi = 2\pi \begin{cases} 1, m' = m - 1 \\ 0, m' \neq m - 1 \end{cases} \Rightarrow \text{заменяя } t = \cos\theta$$

$$2\pi \int_0^{\infty} R_{nl} R_{n'l'} r^3 dr \int_{-1}^1 P_l^m(t) P_{l'}^{m'-1}(t) \sqrt{1-t^2} dt \Rightarrow$$

Используя свойства сферических функций:

$$1) \int_{-1}^1 P_l^m(t) P_{l'}^{m'}(t) dt = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad 2) t P_l^m(t) = a_{lm} P_{l-1}^m + b_{lm} P_{l+1}^m$$

$$3) \sqrt{1-t^2} P_l^m = \alpha_{lm} P_{l-1}^{m-1}(t) + \beta_{lm} P_{l+1}^{m-1}(t)$$

получаем:

$$\triangleright = 2 \int_0^{\infty} R_{nl} R_{n'l'} r^3 dr \left\{ \alpha_{lm} \int_{-1}^1 P_{l-1}^{m-1}(t) P_{l'}^{m-1}(t) dt + \beta_{lm} \int_{-1}^1 P_{l+1}^{m-1}(t) P_{l'}^{m-1}(t) dt \right\} \sim \delta_{l, l' \pm 1} \quad (20)$$

$$\text{Следовательно } \eta = x + iy \rightarrow m' = m - 1 \rightarrow l' = l \pm 1 \rightarrow \Delta l = \pm 1 \quad (21)$$

$$\text{Аналогично покажем что } \xi = x - iy \rightarrow m' = m + 1 \rightarrow l' = l \pm 1 \rightarrow \Delta l = \pm 1 \quad (22)$$

$$\xi_{nlm, n'l'm'} = \int_0^{\infty} R_{lm}(r) R_{l'm'}(r) r^3 dr \int_0^{\pi} P_l^m(\cos\theta) P_{l'}^{m'} \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} e^{-im\varphi} e^{-i\varphi} e^{im'\varphi} d\varphi$$

$$\int_{-1}^1 P_l^m(\cos\theta) P_{l'}^{m'} \sin\theta d\theta = \alpha_{l', m+1}^{m+1} \int_{-1}^1 P_l^m(t) P_{l'-1}^m(t) dt + \beta_{l', m+1} \int_{-1}^1 P_l^m(t) P_{l'+1}^m(t) dt \sim \delta_{l, l' \pm 1}$$

$$\int_0^{2\pi} e^{-im\varphi} e^{-i\varphi} e^{im'\varphi} d\varphi = \int_0^{2\pi} e^{i(-m-1+m')\varphi} d\varphi = 2\pi \delta_{m+1, m'}$$

Из уравнения 3 системы (19) получим

$$z_{nlm, n'l'm'} = \int_0^{\infty} R_{nl} R_{n'l'} r^3 dr \int_0^{\pi} P_l^m(\cos\theta) \cos\theta \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} e^{-im\varphi} e^{im'\varphi} d\varphi$$

$$\int_0^{2\pi} e^{-im\varphi} e^{im'\varphi} d\varphi = \int_0^{2\pi} e^{i(-m+m')\varphi} d\varphi = 2\pi \delta_{m, m'}$$

$$\int_0^\pi P_l^m(\cos \theta) \cos \theta \sin \theta d\theta = \int_{-1}^1 P_l^m(t) P_{l'}^{m'}(t) dt =$$

$$= a_{lm} \int_{-1}^1 P_l^m(t) P_{l'+1}^{m'}(t) dt + b_{lm} \int_{-1}^1 P_l^m(t) P_{l'-1}^{m'}(t) dt = a_{lm} \delta_{l,l'+1} + b_{lm} \delta_{l,l'-1} \quad \text{Правила}$$

відбору по z : $m = m' \rightarrow l' = l \pm 1 \rightarrow \Delta l = \pm 1$ (23)

В результате общие правила отбора из (21), (22) и (23)

$$\Delta l = \pm 1, \Delta m = 0, \pm 1 \quad (25)$$

55 Квадрупольне та мультипольне наближення в теорії випромінювання.

Вероятность перехода за единицу времени (9): (желательно сначала прочитать предыдущие 3 раздела)

$$P_{sm} = \frac{W_{sm}}{t} = \frac{4\pi^2 e^2 I}{\hbar^2 \mu^2 \omega^2 c} \left| \int \psi_s^* e^{\mp i \vec{k} \vec{r}} (\vec{e}_k \hat{p}) \psi_n dv \right|^2 \delta(\omega_{sm} \pm \omega) \quad (26)$$

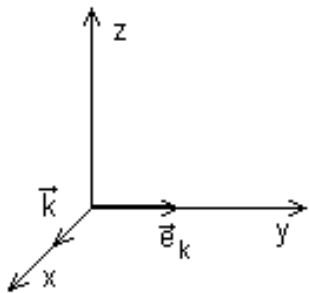
$$\int \psi_s^* e^{\mp i \vec{k} \vec{r}} (\vec{e}_k \hat{p}) \psi_n dv = B_{sm}$$

Как уже говорилось (см. (10), (11), (12)) при $|\vec{k} \vec{r}| \ll 1$ экспоненту

можно разложить в ряд $\exp(\pm i \vec{k} \vec{r}) = 1 \pm i \vec{k} \vec{r} - (\vec{k} \vec{r})^2 / 2 + \dots$

Учет следующих после нулевого степеней разложения (не только \exp) называют **мультипольностью**. Учет же только первого и второго слагаемых (то есть включая первую производную) разложения называют **квадрупольностью**.

$$B_{sn} = \pm \int \psi_s^* i (\vec{k} \vec{r}) (\vec{e}_k \hat{p}) \psi_n dv \quad (27)$$



Если направить оси координат $\vec{k} \parallel Ox$ $\vec{e}_k \parallel Oy$, то с

учетом $\hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$ получим (для тех кто не в курсе поле будет распространяться вдоль x, а $r(x,y,z)$ это радиус вектор из 0 в данную точку)

$$B_{sn}^{(2)} = \pm ik \int \psi_s^* x (-i\hbar \frac{\partial}{\partial y}) \psi_n dv = \pm k\hbar \int \psi_s^* x \frac{\partial}{\partial y} \psi_n dv \Rightarrow \quad (28)$$

$$x \frac{\partial}{\partial y} = \frac{1}{2} (x \frac{\partial}{\partial y} + y \frac{\partial}{\partial x}) + \frac{1}{2} (x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}) \quad (\text{тупо но эффективно})$$

$$\Rightarrow \pm \frac{k\hbar}{2} \left\{ \int \psi_s^* (x \frac{\partial}{\partial y} + y \frac{\partial}{\partial x}) \psi_n dv + \int \psi_s^* (x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}) \psi_n dv \right\} \quad (29)$$

Обозначим $\int \psi_s^* (x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}) \psi_n dv = I_-$ (30) и

$\int \psi_s^* (x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}) \psi_n dv = I_+$ (31) тогда

Используя что $\hat{L} = [\vec{r} \times \hat{p}] = -i\hbar[\vec{r} \times \vec{\nabla}]$ - оператор орбитального или

углового момента. $\hat{L}_z = -i\hbar(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x})$ (32)

$$-i\hbar I_- = \int \psi_s^* (x(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y}) - y(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x})) \psi_n dv =$$

$$= \int \psi_s^* (x\hat{p}_y - y\hat{p}_x) \psi_n dv = \int \psi_s^* \hat{L}_z \psi_n dv = -\frac{2\mu c}{e} \int \psi_s^* \hat{M}_z \psi_n dv$$
 (33)

Где усчитано что оператор импульса $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, и оператор

магнитного момента $\hat{M}_z = -\frac{e}{2\mu c} \hat{L}_z$ (из атомки и не только)

Проведем вычисления которые будут необходимы далее:

$$[xy, \hat{H}_0] \psi = [xy(\frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2\mu} + u) - (\frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2\mu} + u)xy] =$$

$$= \frac{1}{2\mu} \{xy\hat{p}_x^2 + xyp_y^2 - p_x^2 xy - p_y^2 xy\} \psi =$$

$$= \frac{1}{2\mu} \{y(x\hat{p}_x^2 - \hat{p}_x^2 x) + x(y\hat{p}_y^2 - \hat{p}_y^2 y)\} =$$

$$\frac{1}{2\mu} \{y(x\hat{p}_x \hat{p}_x - \hat{p}_x x \hat{p}_x + \hat{p}_x x \hat{p}_x - \hat{p}_x \hat{p}_x x) + x(y\hat{p}_y \hat{p}_y - \hat{p}_y y \hat{p}_y + \hat{p}_y y \hat{p}_y - \hat{p}_y \hat{p}_y x)\} =$$

$$= \frac{1}{2\mu} \{y\hbar p_x + p_x y \hbar + x\hbar p_y + x p_y \hbar\} = \frac{i\hbar}{\mu} (yp_x + xp_y) = \frac{\hbar^2}{\mu} (y \frac{\partial}{\partial x} + x \frac{\partial}{\partial y})$$

(34)

Следовательно $y \frac{\partial}{\partial x} + x \frac{\partial}{\partial y} = \frac{\mu}{\hbar^2} [xy, \hat{H}_0]$ (35). Учитывая что

$$\hat{H}_0 \psi_s = E_s \psi_s, \quad \omega_{sn} = (E_s - E_n) / \hbar \quad \text{и (35)}$$

$$I_+ = \frac{\mu}{\hbar^2} \int \psi_s^* (xy \hat{H}_0 - \hat{H}_0 xy) \psi_n dv = \frac{\mu}{\hbar^2} \left\{ \int \psi_s^* xy \hat{H}_0 \psi_n dv - \int \psi_s^* \hat{H}_0 xy \psi_n dv \right\} = \frac{\mu}{\hbar} \omega_{sn} \int \psi_s^* xy \psi_n dv$$

(36)

Подставляя (36) и (33) в (29) получим:

$$B_{sn}^{(2)} = \pm \frac{k\hbar}{2} \left\{ \frac{\mu \omega_{sn} e}{e\hbar} \int \psi_s^* xy \psi_n dv - \frac{2i\mu c}{e\hbar} \int \psi_s^* \hat{M}_z \psi_n dv \right\} =$$

$$= \pm \frac{k\hbar}{2} \left\{ \frac{\mu \omega_{sn}}{e\hbar} \int \psi_s^* \hat{a}_{xy} \psi_n dv - \frac{2i\mu c}{e\hbar} \int \psi_s^* \hat{M}_z \psi_n dv \right\} \quad (37)$$

Где $\hat{a}_{xy} = e xy$ Матричный элемент $(xy)_{sn} = \int \psi_{nlm}^* xy \psi_{n'l'm'} dv$, с

другой стороны $(xy)_{sn} = \sum_k x_{sk} y_{kn}$ следовательно

$$(xy)_{sn} = (xy)_{nlm, n'l'm'} = \sum_{n''} \sum_{l''} \sum_{m''} x_{nlm, n''l''m''}^* y_{n''l''m'', n'l'm'} \Rightarrow l' = l \pm 1; m'' = m, m \pm 1;$$

Правила отбора:

$$l'' = l' \pm 1; m'' = m'; m' \pm 1; \quad l' = l'' \pm 1 = l \pm 1 \pm 1 = l \pm 2, l;$$

$$\Delta l = 0, \pm 2; \quad m' = m'', m'' \pm l = m, m \pm 1, m \pm 2; \quad \text{Это ел.}$$

квадрупольные переходы: (E₂) $\Delta l = 0, \pm 2; \Delta m = 0, \pm 1, \pm 2;$

Как показывалось раньше ел. дипольные переходы (E₁)

$\Delta l = \pm 1; \Delta m = 0, \pm 1;$ Излучение испускаемое квантовой системой при переходах, обусловленных матричными элементами

$$B_{sn} = \int \Psi_{nlm}^* \hat{L}_z \Psi_{n'l'm'} dV; \quad \text{называется магнитным}$$

дипольным излучением. (H₁) $(L_z^!)_{nlm, n'l'm'} : L_z^* \Psi_{n'l'm'} = m\hbar$

56 Квантова теорія дисперсії

Оскільки пояснювати на пальцях виявилось дуже важко підійдемо до питання здалеку і з формулами =)... Співвідношення фізичної величини конкретного оператора, є правильним тільки тоді, коли

$$\hat{L}_{\text{experiment}} = \hat{L}_{\text{raschet}}$$

$$\hat{L}_1 \psi(x) + \hat{L}_2 \psi(x) = \hat{L} \psi(x) \quad \text{перепозначення: } \hat{L}_2 \hat{L}_1 \psi = \hat{L}_2 \varphi \quad \hat{L} \psi = \varphi$$

$$\hat{L}_2 \hat{L}_1 \psi = \hat{L} \psi \quad \text{ще}$$

$$\text{перепозначення: } \hat{L}_2 = \hat{p}; \hat{L}_1 = \hat{x} \quad \hat{p}_x x \psi = (i\hbar \frac{\partial}{\partial x})(x\psi) \frac{\partial \psi}{\partial x}$$

$$x \hat{p}_x \psi = -i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} \quad \text{Операція комутації: } [\hat{L}\hat{M}] = (\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L}) \quad \text{Якщо}$$

$$[\hat{L}\hat{M}] = \hat{L}\hat{M} \quad \text{то оператори комутують. Так}$$

$$\text{от: } x \hat{p}_x \neq 0 \quad [x \hat{p}_x] \psi = -i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} + i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} + i\hbar \psi = i\hbar \psi \quad \text{У нас}$$

$p_x p_y p_z$ комутують між собою. Побудуємо оператор кінетичної

$$\text{енергії } T = \frac{p^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} = \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta$$

Потенціальна енергія: $\hat{V} = V(x)$.

Оператор Гамільтона, повної енергії $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$ Запишемо

$$L = \frac{1}{M} = \frac{1}{1 - (1 - M)} = \sum (-1)^n (1 - M)^n; \quad \hat{L} = A \sum \frac{(L)^n}{n!} \left(\frac{x(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) + (i\hbar \frac{\partial}{\partial x})x}{2\hbar} \right)^n$$

$$\text{В рамочку: } \int \psi^* \hat{L} \psi dx - \int \psi \hat{L}^* \psi^* dx = (\bar{L} - \bar{L}^*) \quad \text{:Конкретика:}$$

$\Delta L = \bar{L} - L$ Середньоквадратична похибка:

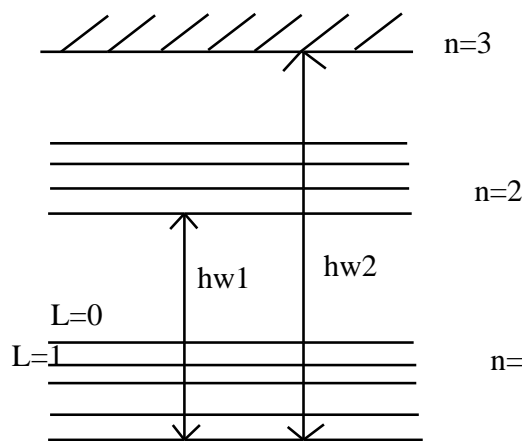
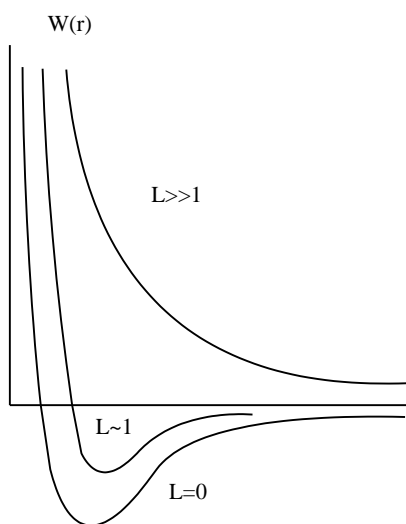
дисперсія: $\Delta \bar{L}^2 = (\bar{L} - L)^2 = \int \psi^* (\bar{L} - \hat{L})^2 \psi dx = \int |(\bar{L} - \hat{L})\psi|^2 dx \geq 0$, у випадку

рівності фізична величина приймає визначене значення.

Практично ми отримали рівняння Шредінгера тільки на постулатах.

57 Атомные и молекулярные спектры.

Эффект Месбауэра



Ответ состоит из двух частей – 1) из ответа на поставленный вопрос, и 2) из того что нам рассказывали на лекции =): 1) Сначала говорится

о том, что отдельные атомы атомы могут излучать только порциями (постулаты Бора) энергии

$E = h\nu$ (простой пример: два поплавок в шторм с частыми волнами, поднимаются чаще чем в шторм с более редкими с одинаковой амплитудой, отсюда пропорциональность частоте). Потом логично парить о том что переходы с одного уровня на другой вызывают излучения/поглощения на частотах, зависящих от соответственных уровней (появление серий Пашена, Бальмера, Лаймана в атоме водорода). Можно рассказать о том, что по количеству серий, можно к примеру определить количество энергетических уровней атома, а при более детальном рассмотрении, и подуровней. 2) "Квантові рівні двоатомної молекули": модель: два атома А та В між ними зв'язок довжини r . Запишемо умову

вільності системи: $1/\mu = 1/m_A + 1/m_B$ Запишемо гамільтоніан системи

$$\hat{H} = \hat{T}_r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + U(r)$$

$$\psi(r, \Theta, \varphi) = Y_{lm}(\Theta, \varphi) R_{nl}(r) \quad R(r) = \frac{X(r)}{r} \quad (???) \text{ пояснення цих}$$

формул у мене немає, але це схоже просто на "от візьмемо такий вигляд розв'язку". Запишемо рівняння Шрєдінгера:

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 X}{dr^2} + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + U(r) \right] X(r) = EX(r)$$

Те що у квадратних дужках, це

$W(r)$ – сумарна потенціальна енергії молекули. Із збільшенням l ми наближаємось до неперервного спектру (графік). Знайдемо

мінімум потенціалу $\frac{dW_l}{dt} = \frac{dU}{dr} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} = 0$ В околі точки мінімуму

(r_l) розкладаємо у ряд $W_l(r) = W_l(r_l) + \frac{\mu W_l^2(r_l)(r - r_l)^2}{2}$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 X}{dr^2} + \frac{1}{2} \mu W_l^2(r - r_l)^2 X = (E - W_l(r_l)) X - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} X$$

ми отримали

рів-ня Шрєдінгера для гармонічного осцилятора:

$$E'_n = \hbar W_l(n + 1/2) \quad X_n(r) = C_n e^{-\psi/2} H_n(\xi) \quad \xi = \frac{(r - r_l)}{\sqrt{\frac{\hbar}{\mu W_l}}} \quad \text{Енергія}$$

молекули складається з трьох доданків:

$$E_n = U(r) + \hbar W_l(n + 1/2) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}$$

Другий доданок – енергія

коливання, третій – енергія обертання (квант обертального руху).

Ефект Мессбауера

Ефект Мессбауера — фізичне явище резонансного поглинання гамма-випромінювання атомів у твердому тілі. Ефект названо на честь Рудольфа Мессбауера, який у 1957 розробив метод спостереження резонансного поглинання. Використовується для вивчення енергетичних рівнів атомного ядра.

Фізична природа явища

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 вбирає 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 в порожнечі. 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.

Використання

Мессбауерівська спектроскопія є одним із методів матеріалознавства, тонким інструментом, який дозволяє визначити хімічні характеристики оточення радіоактивних атомів. Найчастіше вона використовує ядра ^{57}Fe

58 Квантування електромагнітного поля. Фотони. Енергія квантового 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:

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}} \sum_{\rho}^1 (a_{\rho k} \vec{l}_{\rho k} e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega_k t)} + a_{\rho k}^* \vec{l}_{\rho k} e^{-i(\vec{k}\vec{r} - \omega_k t)}) \quad \nabla \vec{A} = 0; \vec{l}_{\rho k} \perp \vec{k};$$

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}; \vec{H} = \nabla \times \vec{A};$$

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 :

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

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

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

$$\int_V e^{i\Delta\vec{k}\vec{r}} = V\delta_{\Delta\vec{k},0} \Rightarrow W = \sum_{\vec{k}\vec{k}'} \sum_{\rho, \rho'} \frac{\omega_k \omega_{k'}}{4\pi c^2} (a_{\rho k} a_{\rho' k'}^* + a_{\rho k}^* a_{\rho' k'}) \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\rho\rho'} = \sum_{\rho k=1} \sum_{\vec{k}} W_{\rho k}$$

Де: $W_{\rho k} = \frac{\omega_k^2}{4\pi c^2} (a_{\rho k} a_{\rho k}^* + a_{\rho k}^* a_{\rho k})$ - енергія однієї моди. Введемо

узагальнені координати імпульсу та шляху: $\theta_{\rho k} = \sqrt{\frac{V}{4\pi c^2}} (a_{\rho k} + a_{\rho k}^*);$

$$P_{\rho k} = -i\omega_k \sqrt{\frac{V}{4\pi c^2}} (a_{\rho k} - a_{\rho k}^*);$$

Тоді з двох останніх формул:

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

$$W_{\rho k} = \frac{P_{\rho k}^2}{2} + \omega_k^2 \frac{\theta_{\rho k}^2}{2} . \quad \text{Отже ми проквантували поле: -первинне}$$

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 існуює

енергія нуьових коливань вакуума: $E_{\rho k} = \hbar \omega_k (n_{\rho k} + 1/2)$ Ця
рівність впливає з співвідношення невизначеності.

59 Просторова та частотна густина станів.

Знайдемо густину розподілу мод:

$$L_x = n_x \lambda_x; \delta k_x = k_x(n_x + 1) - k_x n_x = 2\pi / L_x; \quad \Delta n_x = \frac{\Delta k_x}{\delta k_x} = \frac{\Delta k_x L_x}{2\pi}$$

Знайдемо кількість мод в об'ємі, проекції яких лежать в інтервалі [k,

$$k + dk] : \quad \Delta n = \Delta n_x \Delta n_y \Delta n_z = 2 \frac{L_x L_y L_z \Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z}{(2\pi)^3}; \quad \text{2 перед}$$

дробом з'явилась за рахунок поляризації. $\Delta n = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} k^2 \Delta k \Delta \Omega$;

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

поширюються в тілесній кулі

$$4\pi \cdot \frac{dn}{dk} = \frac{V k^2}{\pi^2} \quad \frac{dn}{d\omega} = \frac{V \omega^2}{\pi^2 c^3} = \rho(V, \omega) \quad \text{- кількість мод в}$$

одиничному 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 .

60 Взаємодія квантованого ел.-маг. Поля з атомом.

Розглянемо динаміку процесу взаємодії атома з квантованим електромагнітним полем, використовуючи метод Вайскопфа-Вігнера . Оператор Гамільтона всієї системи має

$$\text{вигляд } \hat{H}(\vec{r}) = \hat{H}_A(\vec{r}_A) + \hat{H}_F(\vec{q}) + \hat{V}(\vec{r}_A, \vec{q}) \quad (12) \quad \hat{H}_A - \text{оператор}$$

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 $\varphi_0(\vec{q})$ і має вигляд $\psi_{a0}(\vec{r}) \equiv \psi_a(\vec{r}_A) \varphi_{\{0,0,\dots,0\}}(\vec{q})$; $\varphi_{\{0,0,\dots,0\}}(\vec{q}) \equiv \prod_{\beta} \varphi_{0\beta}(\vec{q})$ 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 $\varphi_{0\beta}(\vec{q})$ 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 $E_{n_{\beta}=1}$, 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

$$\text{має вигляд } \psi_{0\beta}(\vec{r}) = \psi_0(\vec{r}_A) \varphi_{\{0, \beta, \dots, 0\}}(\vec{q}); \varphi_{\{0, \beta, \dots, 0\}}(\vec{q}) = \varphi_{1\beta}$$

$$(\vec{q}) \prod_{\alpha \neq \beta} \varphi_{0\alpha}(\vec{q}) \text{ мода поля з номером } \beta \text{ знаходяться в}$$

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

$$\text{основного стану всієї системи рівна нулю: } E_g + \sum_{\beta} E_{n_\beta=0} = 0. \text{ У}$$

відповідності з принципом суперпозиції загальна хвильова функція

$$\psi(\vec{r}, t) \text{ всієї системи має вигляд } \psi(\vec{r}, t) = A(t) \psi_{a0}(\vec{r}) \exp(-iE_a t/\hbar) +$$

$$\sum_{\beta} F_{\beta}(t) \psi_{0\beta}(\vec{r}) \exp(-iE_{\beta} t/\hbar) = A(t) \psi_a(\vec{r}_A) \varphi_{\{0, 0, \dots, 0\}}(\vec{q}) \exp(-iE_a t/\hbar) +$$

$$\sum_{\beta} F_{\beta}(t) \psi_0(\vec{r}_A) \varphi_{\{0, \beta, \dots, 0\}}(\vec{q}) \exp(-iE_{\beta} t/\hbar) \quad (13) \text{ В цьому виразі залежні}$$

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

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

Після підстановки в рівняння Шредингера загальної хвильової

$$\text{функції (13) отримаємо рівняння } i\hbar \{(\partial A / \partial t) \psi_a(\vec{r}_A) \varphi_{\{0, 0, \dots, 0\}}(\vec{q}) \exp(-$$

$$i\omega_a t) + \sum_{\beta} (\partial F_{\beta} / \partial t) \psi_0(\vec{r}_A) \varphi_{\{0, \beta, \dots, 0\}}(\vec{q}) \exp(-i\omega_{\beta} t)\} =$$

$$\hat{V}(\vec{r}_A, \vec{q}) \{A \psi_a(\vec{r}_A) \varphi_{\{0, 0, \dots, 0\}}(\vec{q}) \exp(-i\omega_a t) + \sum_{\beta} F_{\beta} \psi_0(\vec{r}_A) \varphi_{\{0, \beta, \dots, 0\}}(\vec{q})$$

$\exp(-i\omega_\beta t)$ }. 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 $\psi_\alpha^*(\vec{r}_A) \varphi_{\{0,0,\dots,0\}}^*(\vec{q})$, яка відповідає збудженому стану атома і потім проінтегруємо по всій області зміни аргументів, а другий раз на одну з власних функцій

$\psi_0^*(\vec{r}_A) \varphi_{\{0,\beta,\dots,0\}}^*(\vec{q})$, 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 $i\hbar \exp(-i\omega_\alpha t) \partial A / \partial t = \sum_\beta F_\beta V_{\alpha\beta} \exp(-i\omega_\beta t)$, (14a) $i\hbar \exp(-i\omega_\beta t) \partial F_\beta / \partial t = A V_{\alpha\beta}^* \exp(-i\omega_\alpha t)$ (14b) В системі (14) матричні елементи $V_{\alpha\beta}$ енергії взаємодії атома з квантованим

полем мають вигляд $V_{\alpha\beta} = \int \psi_\alpha^*(\vec{r}_A) \varphi_{\{0,0,\dots,0\}}^*(\vec{q}) \widehat{V}(\vec{r}_A, \vec{q}) \psi_0^*(\vec{r}_A) \varphi_{\{0,\alpha,\dots,0\}}(\vec{q}) dV_A dV_q$ (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 $(i\omega_a + p)A_p = A(0) + \sum_{\beta} F_{\beta p} V_{\alpha\beta} / i\hbar$, (18a) $(i\omega_{\beta} + p)F_{\beta p} = F_{\beta}(0) + A_p (V_{\alpha\beta}^* / i\hbar)$ (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 $F_{\beta p} = A_p [V_{\alpha\beta}^* / i\hbar(i\omega_{\beta} + p)]$, то можна виключити з системи (18) амплітуду $F_{\beta p}$. Отримане рівняння

$A_p = A(0) / \{i\omega_a + p + \sum_{\beta} |V_{\alpha\beta}|^2 / \hbar^2 (i\omega_{\beta} + p)\}$ (19) дозволяє за допомогою оберненого перетворення Лапласа (16a) знайти

шуканий розв'язок для $A(t) = (2\pi i)^{-1} \exp(i\omega_a t) \int_{\delta-i\infty}^{\delta+i\infty} A_p \exp(pt) dp =$

$A(0)(2\pi i)^{-1} \int_{\delta-i\infty}^{\delta+i\infty} \exp[(i\omega_a + p)t] dp / \{i\omega_a + p + \sum_{\beta} |V_{\alpha\beta}|^2 / \hbar^2 (i\omega_{\beta} + p)\}$ (20)

Після заміни $p = i(\omega - \omega_a)$ цей вираз приймає вигляд $A(t) = A(0)(2\pi i)^{-1}$

$\int_{-\infty-i\delta}^{\infty-i\delta} \exp(i\omega t) d\omega / \{\omega - \sum_{\beta} |V_{\alpha\beta}|^2 / \hbar^2 (\omega_{\beta} + \omega - \omega_a)\}$ (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 $W(\omega) = |A(\omega)|^2 = |1 / \{\omega -$

$$\sum_{\beta} |V_{\alpha\beta}|^2 / \hbar^2 (\omega_{\beta} + \omega - \omega_a)\} |^2.$$

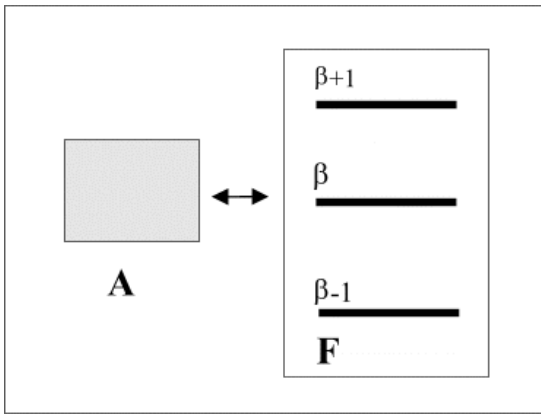
61 Взаємодія атома з однією резонансною модою поля (Це взятє просто з методички Висоцького тому не дивуйтесь позначеня формул)

Як слїдує з загального розв'язку задачї: $A(t) = A(0)(2\pi i)^{-1} \int_{-\infty-i\delta}^{\infty-i\delta} \exp(i\omega t) d\omega / \{\omega - \sum_{\beta} |V_{a\beta}|^2 / \hbar^2 (\omega_{\beta} + \omega - \omega_a)\}$ (21), амплїтуда та ймовїрнїсть спонтанного розпаду їстотно залежїть вїд значення суми

$\sum_{\beta} |V_{a\beta}|^2 / \hbar^2 (\omega_{\beta} + \omega - \omega_a)$, що стоїть в знаменнику (21) і враховує зв'язок кожної з мод поля з атомом.

Розглянемо той частинний випадок, коли міжмодовий їнтервал $\delta\omega_{\beta} = |\omega_{\beta} - \omega_{\beta\pm 1}|$ в конкретнїй електродинамїчнїй системї є настїльки великим, що їстотний вклад в цю суму дає тїльки один (резонансний) член $|V_{a\beta}|^2 / \hbar^2 (\omega_{\beta} + \omega - \omega_a)$, для якого $\omega_{\beta} \approx \omega - \omega_a$. Всї їншї (нерезонанснї) члени суми малї і для них $|V_{a, \beta\pm\Delta\beta}|^2 / \hbar^2 (\omega_{\beta\pm\Delta\beta} + \omega - \omega_a) \ll |V_{a\beta}|^2 / \hbar^2 (\omega_{\beta} + \omega - \omega_a)|$. (23) Необхїдно зауважити, що таке обмеження числа мод, якї впливають на процес взаємодїї атома з полем, тїльки однїєю модою базується не тїльки на тому фактї, що знаменники вїдповїдних нерезонансних членів суми (23) зменшуються з збїльшенням міжмодової вїдстанї. Очевїдно, що таке спадання (по закону $1/(\omega_{\beta\pm\Delta\beta} + \omega - \omega_a)$) само по собї не

забезпечує збїжностї членів суми $\sum_{\beta} |V_{a\beta}|^2 / \hbar^2 (\omega_{\beta} + \omega - \omega_a)$ і у вїдсутностї їнших механїзмів збїжностї приводило б до логарифмїчної розбїжностї. Збїжнїсть членів цїєї суми пов'язана в першу чергу з явищем швїдкого зменшення вїдповїдних матричних елементів $|V_{a, \beta\pm\Delta\beta}|$ для нерезонансних мод з збїльшенням вїдстройки $\Delta\beta$ вїд оптимальної моди з $\Delta\beta = 0$. У символїчному виглядї таке обмеження числа їстотних для процесу взаємодїї з атомом А мод β поля F зображене на рис. 1.



При виконанні умови (23) з рівняння (21) маємо $A(t) = A(0)(2\pi i)^{-1}$

$$\int_{-\infty - i\delta}^{\infty - i\delta} \exp(i\omega t) d\omega / \{ \omega - |V_{\alpha\beta}|^2 / \hbar^2 (\omega_{\beta} + \omega - \omega_{\alpha}) \} \quad (24)$$

Після введення додаткових позначень $\omega_{\beta} - \omega_{\alpha} = \delta\omega$, $|V_{\alpha\beta}| / \hbar = \Omega_0$, вираз (24)

можна перетворити до еквівалентної і більш зручної для

розрахунків форми $A(t) = A(0)(2\pi i)^{-1} \int_{-\infty - i\delta}^{\infty - i\delta} (\delta\omega + \omega) \exp(i\omega t) d\omega / (\omega - \omega_1)(\omega - \omega_2)$, (25) в якій дві частоти

$$\omega_{1,2} = -\delta\omega/2 \pm \Omega; \quad \Omega = [(\delta\omega/2)^2 + \Omega_0^2]^{1/2} \quad (26)$$

є полюсами підінтегрального виразу (25), які лежать на дійсній осі площини

комплексних частот ω .

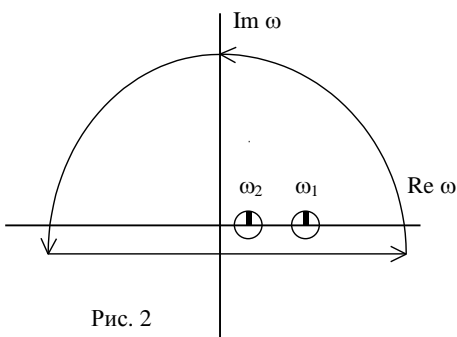


Рис. 2

Для обчислення інтегралу необхідно замкнути шлях інтегрування дугою нескінченно великого радіусу, що лежить у верхній півплощині. Оскільки шлях інтегрування в (25) проходить нижче дійсної осі, то обидва полюси лежать в середині

контуру інтегрування (рис.2).

Цей комплексний інтеграл будемо обраховувати за допомогою методу лишків, що зразу приводить до розв'язку $A(t) = 2\pi i [\text{res}(\omega_1) + \text{res}(\omega_2)]$.

Обраховуючи лишки в полюсах підінтегрального виразу $\omega_{1,2}$, знаходимо остаточний вираз для амплітуди $A(t)$ та повної ймовірності $W(t) = |A(t)|^2$ збудженого стану атома $A(t) = A(0) [\cos\Omega t + i(\delta\omega/2\Omega) \sin\Omega t] \exp[-i(\delta\omega/2)t]$ (27)

$$W(t) = |A(t)|^2 = \cos^2\Omega t + (\delta\omega/2\Omega)^2 \sin^2\Omega t = 1 - [\Omega_0^2 / (\Omega_0^2 + (\delta\omega/2)^2)] \sin^2([\Omega_0^2 + (\delta\omega/2)^2]^{1/2} t) \quad (28)$$

Згадаємо, що повна хвильова функція атома, що відповідає збудженому стану, згідно з принципом суперпозиції (13) має

вигляд $\psi_e(\vec{r}, t) = A(t) \psi_{a0}(\vec{r}) \exp(-iE_a t/\hbar)$ Якщо підставити в це співвідношення

явний вираз для $A(t)$ (27), то хвильова функції повної системи (атом + поле) в збудженому стані атома приймає остаточний вигляд

$$\psi_e(\vec{r}, t) = A(0) \psi_a(\vec{r}_A) \varphi_{\{0,0,\dots,0\}}(\vec{q}) [\cos\Omega t + i(\delta\omega/2\Omega) \sin\Omega t] \exp[-i(E_a/\hbar + \delta\omega/2)t] = A(0) \psi_a(\vec{r}_A) \varphi_{\{0,0,\dots,0\}}(\vec{q}) (1/2) \{ [1 + (\delta\omega/2\Omega)] \exp[-i(E_a/\hbar - \Omega + \delta\omega/2)t] + [1 - (\delta\omega/2\Omega)] \exp[-i(E_a/\hbar + \Omega + \delta\omega/2)t] \} \quad (29)$$

Видно, що в такій системі енергія не рівна власному значенню E_a оператора Гамільтона атома, а відповідає наявності двох ефективних динамічних підрівнів $E_a^* = E_a + \delta\omega/2 \pm \Omega$, що є наслідком розщеплення одного рівня за рахунок взаємодії з модою поля, тобто є своєрідним динамічним ефектом Штарка.

Розглянемо більш детально часову залежність ймовірності збудженого стану атома. З формули (26) видно, що характер взаємодії збудженого атома з однією модою носить характер незатухаючого коливального процесу з періодичним збудженням атома (переходом з основного в збуджений стан) та його дезбудженням (зворотнім переходом з збудженого в основний стан). Такий процес відповідає періодичному обміну енергією між атомом та модою поля.

Частота обміну $\Omega = [(\delta\omega/2)^2 + \Omega_0^2]^{1/2}$ та амплітуда коливань ймовірності збудженого стану атома залежить як від енергії взаємодії атома з модою $\Omega_0 = |V_{a\beta}|/\hbar$, так і від спектральної відстройки $\delta\omega$.

У випадку точного резонансу ($\delta\omega=0$) маємо $W(t) = |A(t)|^2 = \cos^2\Omega_0 t$ (30a) Очевидно, що внаслідок нормування повної ймовірності знаходження атома та єдиної моди поля в збудженому стані $|A(t)|^2 + |F_\beta(t)|^2 = 1$, ймовірність збудженого стану моди поля при ($\delta\omega=0$) описується виразом $|F_\beta(t)|^2 = \sin^2\Omega_0 t$ (30b)

Співставляючи ці результати з (29) видно, що частота $2\Omega_0$ є мінімальна частота процесу обміну між полем та атомом. Період

повторного збудження атома при умові точного резонансу $T = \pi/\Omega_0 = \pi\hbar/|V_{\alpha\beta}|$ визначається величиною матричного елемента $V_{\alpha\beta}$ енергії взаємодіє атома з модою поля. Цей матричний елемент аналогічний виразу (11), залежить від характеристик конкретного атома, його положення \vec{r}_a та конкретної конфігурації моди поля і після використання введених для даної системи позначень має

$$V_{\alpha\beta} = -i(2\pi\hbar\omega_\beta/V_0)^{1/2} (\vec{d}_{\alpha\beta}\vec{e}_\beta) \exp[-i(\vec{k}_\beta\vec{r}_a + \varphi_\beta)].$$

Використовуючи це значення $V_{\alpha\beta}$, знаходимо остаточний вираз для оцінки періоду передачі збудження між атомом та модою поля

$$T \approx \pi\hbar/|V_{\alpha\beta}| = \pi\hbar\{V_0/2\pi\hbar\omega_\beta |(\vec{d}_{eg}\vec{e}_\beta)|^2\}^{1/2}$$

Видно, що період обміну енергією T зростає з збільшенням об'єму квантування поля V_0 і зменшується з зростанням частоти моди (яка приблизно співпадає з частотою атомного переходу) та матричного елемента дипольного моменту атома. Мінімальний період T

відповідає орієнтації дипольного моменту атома \vec{d} в напрямку вектору поляризації моди поля \vec{e}_β .

Якщо прийняти для дипольного моменту наближену і часто

вживану оцінку $|\vec{d}_{eg}| \approx ea$ (де e - заряд електрона, $a \approx 0,5 \text{ \AA}$ -

радіус борівської орбіти), то при такій взаємній орієнтації \vec{d} та \vec{e}_β період осциляцій процесу самозбудження атома з частотою переходу $\omega_a = 3,5 \cdot 10^{10} \text{ c}^{-1}$ в об'ємі квантування $V_0 = 10^3 \text{ cm}^3$ рівний $T \approx 3 \text{ c}$.

В тому випадку, коли вектор поляризації моди ортогональний до

дипольного моменту атома і $(\vec{d}_{eg}\vec{e}_\beta) = 0$, атом не взаємодіє з модою поля і його стан з часом не змінюється. При збільшенні $|\delta\omega|$ частота обміну енергії збільшується і рівна

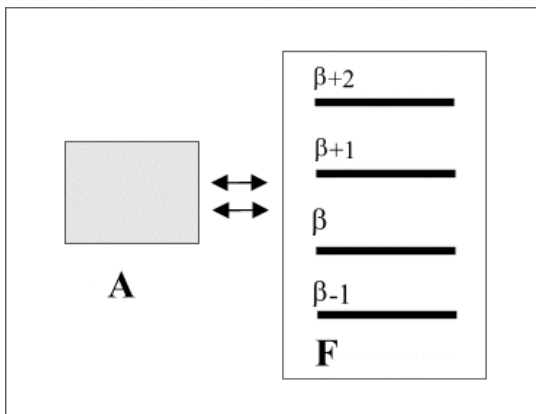
$\Omega = [(\delta\omega/2)^2 + \Omega_0^2]^{1/2}$, а коливання амплітуди ймовірності, навпаки, зменшуються. В цьому випадку з розв'язку (29) знаходимо вирази для ймовірності $|A(t)|^2$ збудженого стану атома та ймовірності $|F_\beta(t)|^2$ збудження моди поля $|A(t)|^2 = 1 - [1/(1 + (\delta\omega/2\Omega_0)^2)] \sin^2\Omega t$, (31a)

$$|F_\beta(t)|^2 = [1/(1 + (\delta\omega/2\Omega_0)^2)] \sin^2\Omega t \quad (31b)$$

З цих розв'язків видно, що при умові $|\delta\omega| \gg \Omega_0$ $|A(t)|^2 \rightarrow \cos^2\Omega t$, $|F_\beta(t)|^2 \rightarrow 0$, тобто при порушенні умови резонансності процес обміну енергією між атомом та модою поля стає практично непомітним. Саме ця обставина і визначає можливість знехтувати впливом нерезонансних мод у випадку розрідженого спектру мод електромагнітного поля.

62 Взаємодія атома з двома симетрично розташованими резонансними модами поля

Розглянемо ще один частинний випадок, коли атом одночасно взаємодіє з двома модами поля з номерами β та $\beta+1$ (рис. 3). Для цього будемо вважати, що істотний вклад в обрахування суми $\sum_{\beta} |V_{a\beta}|^2 / \hbar^2 (\omega_{\beta} + \omega - \omega_a)$, що стоїть в знаменнику виразу для загального розв'язку (21), дають тільки моди з частотами ω_{β} та $\omega_{\beta+1}$, для яких виконуються умови резонансної взаємодії з атомом $|\omega_a - \omega_{\beta}|, |\omega_a - \omega_{\beta+1}| \ll |\omega_a - \omega_{\beta-1}|, |\omega_a - \omega_{\beta+2}|, |\omega_a - \omega_{\beta+3}|, \dots$ (32)



Для спрощення розв'язку будемо вважати, що частоти ω_{β} та $\omega_{\beta+1}$ цих істотних для розгляду задач мод розташовані симетрично (з розстройкою $\pm \delta\omega/2$) по відношенню до частоти ω_a переходу в атомі і $\omega_{\beta+1, \beta} = \omega_a \pm \delta\omega/2$. (33) У символічному вигляді такі умови відображені на рис. 3.

Крім того, будемо вважати, що взаємодія цих мод з атомом характеризується однаковим значенням ефективної частоти взаємодії $|V_{a\beta}| = |V_{a\beta+1}| = \hbar\Omega_0$ (34)

При виконанні цих умов з виразу (21) знаходимо $A(t) = A(0)(2\pi i)^{-1} \int_{-\infty-i\delta}^{\infty-i\delta} \exp(i\omega t) d\omega / \{\omega - \Omega_0^2 [1/(\omega + \delta\omega/2) + 1/(\omega - \delta\omega/2)]\}$ (35) Цей вираз легко перетворити до вигляду

$$A(t) = A(0)(2\pi i)^{-1} \int_{-\infty-i\delta}^{\infty-i\delta} [\omega^2 - (\delta\omega/2)^2] \exp(i\omega t) d\omega / \{\omega(\omega - \Omega_1)(\omega + \Omega_1)\}, \quad (36)$$

зручного для наступного інтегрування. В інтегралі, який входить до виразу (36), введено позначення $\Omega_1 = [2\Omega_0^2 + (\delta\omega/2)^2]^{1/2}$. (37)

З виду підінтегральної функції (36) видна наявність трьох полюсів в точках $\omega_1 = 0$; $\omega_{2,3} = \pm \Omega_1$ на дійсній осі площини комплексних частот ω . Для обрахування інтегралу замкнемо шлях інтегрування

дугою нескінченно великого радіусу, що лежить у верхній півплощині. При цьому всі полюси лежать в середині контуру інтегрування (рис.4). Обраховуючи лишки в полюсах $\omega_{1,2,3}$ підінтегральної функції (36), знаходимо остаточний вираз для амплітуди $A(t)$ та повної ймовірності $W(t) = |A(t)|^2$ збудженого стану атома

$$A(t)=A(0) \{1 - 4(\Omega_0/\Omega_1)^2 \sin^2[(\Omega_1/2)t]\}, W(t) = |A(t)|^2. \quad (38)$$

Амплітуди збудження кожної з двох резонансних мод можуть бути знайдені з рівняння (14b) і в загальному випадку мають досить громіздкий вигляд

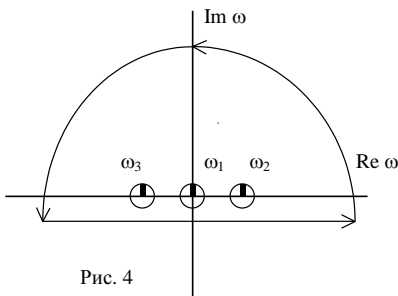


Рис. 4

$$F_{\beta}(t)=-A(0)(V_{\alpha\beta}^*/2\hbar)\{[\exp(i(\sqrt{2}V_{\alpha\beta}^*/\hbar - \delta\omega/2)t)-1]/(\sqrt{2}V_{\alpha\beta}^*/\hbar - \delta\omega/2) - [\exp(-i(\sqrt{2}V_{\alpha\beta}^*/\hbar + \delta\omega/2)t)-1]/(\sqrt{2}V_{\alpha\beta}^*/\hbar + \delta\omega/2)\}; \quad (39a)$$

$$F_{\beta+1}(t)=-A(0)(V_{\alpha\beta+1}^*/2\hbar)\{[\exp(i(\sqrt{2}V_{\alpha\beta+1}^*/\hbar + \delta\omega/2)t)-1]/(\sqrt{2}V_{\alpha\beta+1}^*/\hbar + \delta\omega/2) - [\exp(-i(\sqrt{2}V_{\alpha\beta+1}^*/\hbar - \delta\omega/2)t)-1]/(\sqrt{2}V_{\alpha\beta+1}^*/\hbar - \delta\omega/2)\}. \quad (39b)$$

Якщо виконана додаткова умова $|V_{\alpha\beta}/\hbar| \gg |\delta\omega|$ (вона може бути виконана, наприклад, при дуже малій розстройці $|\delta\omega|$), то для інтервалу часу $t \ll 1/|\delta\omega|$ виконується наближення точного резонансу ($\delta\omega \approx 0$) і з розв'язків (38), (39a) та (39b) можуть бути знайдені вирази для амплітуди та ймовірності збудженого стану атома $A(t) \approx A(0) \cos(\sqrt{2}\Omega_0 t)$, $W(t) = |A(t)|^2 \approx \cos^2(\sqrt{2}\Omega_0 t)$ (40) та ймовірності збудженого стану мод поля $|F_{\beta}(t)|^2 \approx |F_{\beta+1}(t)|^2 \approx (1/2) \sin^2(\sqrt{2}\Omega_0 t)$ (41)

Співставляючи ці результати з (37) та (40), бачимо, що частота $\Omega_0\sqrt{8}$ є мінімальна частота процесу обміну між полем та атомом у випадку взаємодії атома з двома резонансними модами поля. Таким чином, процес взаємодії атома як з однією, так і з двома резонансними модами носить періодичний (осцилюючий), а не затухаючий характер. Інакше кажучи, в такій системі ніякого незворотнього спонтанного розпаду атома не буде.

Якісно подібна ситуація буде і в тому випадку, коли атом взаємодіє з невеликою кількістю мод поля, частоти яких розташовані несиметрично відносно частоти переходу атома. В цьому випадку сам закон обміну енергією між атомом та модами поля буде, звичайно, відрізнятися від гармонічного закону, який характерний для взаємодії з однією модою, або з двома симетрично розташованими модами, але головна риса процесу залишається незмінною - процес обміну є періодичним і незатухаючим.

Коефіцієнти Ейнштейна для спонтанного та вимушеного випромінювання.

§ 44. Испускание и поглощение

Вероятность перехода под влиянием возмущения \hat{V} в первом приближении дается известными формулами теории возмущений (III, § 42). Пусть начальное и конечное состояния излучающей системы относятся к дискретному спектру ¹⁾. Тогда вероятность (в единицу времени) перехода $i \rightarrow f$ с испусканием фотона есть

$$d\omega = 2\pi |V_{fi}|^2 \delta(E_i - E_f - \omega) dv, \quad (44,1)$$

где v условно обозначает совокупность величин, характеризующих состояние фотона и пробегающих непрерывный ряд значений (при этом волновая функция фотона предполагается нормированной на δ -функцию «по шкале v »).

Если испускается фотон с определенным значением момента, то единственной непрерывной величиной является частота ω . Интегрирование формулы (44,1) по $dv \equiv d\omega$ устраняет δ -функцию (заменяя ω определенным значением $\omega = E_i - E_f$), и тогда вероятность перехода

$$\omega = 2\pi |V_{fi}|^2. \quad (44,2)$$

Если же рассматривается испускание фотона с заданным импульсом k , то $dv = d^3k / (2\pi)^3 = \omega^2 d\omega d\Omega / (2\pi)^3$. При этом предполагается, что волновая функция фотона (плоская волна) нормирована на один фотон в объеме $V = 1$, как это принято везде в этой книге; dv есть число состояний, приходящихся на фазовый объем $V d^3k$. Таким образом, вероятность испускания фотона с заданным импульсом запишется в виде

$$d\omega = 2\pi |V_{fi}|^2 \delta(E_i - E_f - \omega) \frac{d^3k}{(2\pi)^3}, \quad (44,3)$$

или после интегрирования по $d\Omega$:

$$d\omega = \frac{1}{4\pi^2} |V_{fi}|^2 \omega^2 d\omega. \quad (44,4)$$

Сюда должен быть подставлен матричный элемент V_{fi} из (43,10).

В следующих параграфах мы воспользуемся этими формулами для вычисления вероятности излучения в различных конкрет-

ных случаях. Здесь мы рассмотрим некоторые общие соотношения между различными видами радиационных процессов.

Если в начальном состоянии поля уже имелось отличное от нуля число N_n данных фотонов, то матричный элемент перехода умножается еще на

$$\langle N_n + 1 | c_n^+ | N_n \rangle = \sqrt{N_n + 1}, \quad (44,5)$$

т. е. вероятность перехода умножается на $N_n + 1$. Единица в этом множителе отвечает спонтанному испусканию, происходящему и при $N_n = 0$. Член же N_n обуславливает *вынужденное* (или *индуцированное*) испускание: мы видим, что наличие фотонов в начальном состоянии поля стимулирует дополнительное испускание таких же фотонов.

Матричный элемент V_{if} перехода с обратным изменением состояния системы ($f \rightarrow i$) отличается от элемента V_{fi} заменой (44,5) на

$$\langle N_n - 1 | c_n | N_n \rangle = \sqrt{N_n}$$

(и заменой остальных величин их комплексно-сопряженными). Этот обратный переход представляет собой поглощение фотона системой, переходящей с уровня E_f на уровень E_i . Поэтому между вероятностями испускания и поглощения фотона (для заданной пары состояний i, f) имеет место важное соотношение¹⁾

$$\frac{\omega^{(\text{изл})}}{\omega^{(\text{погл})}} = \frac{N_n + 1}{N_n} \quad (44,6)$$

(оно было впервые указано А. Эйнштейном в 1916 г.).

Свяжем число фотонов с интенсивностью падающего извне на систему излучения. Пусть

$$I_{ke} d\omega do \quad (44,7)$$

есть энергия излучения, падающего в единицу времени на единицу площади и имеющего поляризацию e , частоту — в интервале $d\omega$ и направление волнового вектора — в элементе телесного угла do . Указанным интервалам отвечают $k^2 dk do / (2\pi)^3$ осцилляторов поля, на каждый из которых приходится по N_{ke} фотонов заданной поляризации. Поэтому ту же энергию (44,7) мы получим, составив произведение

$$c \frac{k^2 dk do}{(2\pi)^3} N_{ke} \hbar \omega = \frac{\hbar \omega^3}{8\pi^3 c^2} N_{ke} d\omega do.$$

Отсюда находим искомое соотношение:

$$N_{ke} = \frac{8\pi^3 c^2}{\hbar \omega^3} I_{ke}. \quad (44,8)$$

Пусть $d\omega_{ke}^{(сп)}$ есть вероятность спонтанного излучения фотона с поляризацией e в телесный угол do ; индексами (инд) и (погл) отметим аналогичные вероятности для индуцированного испускания и поглощения. Согласно (44,6) и (44,8) эти вероятности связаны между собой следующими соотношениями:

$$d\omega_{ke}^{(погл)} = d\omega_{ke}^{(инд)} = d\omega_{ke}^{(сп)} \frac{8\pi^3 c^2}{\hbar\omega^3} I_{ke}. \quad (44,9)$$

Если падающее излучение изотропно и не поляризовано (I_{ke} не зависит от направлений k и e), то интегрирование (44,9) по do и суммирование по e дают аналогичные соотношения между полными вероятностями радиационных переходов (между заданными состояниями i и f системы)

$$\omega^{(погл)} = \omega^{(инд)} = \omega^{(сп)} \frac{\pi^2 c^2}{\hbar\omega^3} I, \quad (44,10)$$

где $I = 2 \cdot 4\pi I_{ke}$ — полная спектральная интенсивность падающего излучения.

Если состояния i и f излучающей (или поглощающей) системы вырождены, то полная вероятность излучения (или поглощения) данных фотонов получается суммированием по всем взаимно вырожденным конечным состояниям и усреднением по всем возможным начальным состояниям. Обозначим кратности вырождения (статистические веса) состояний i и f посредством g_i и g_f . Для процессов спонтанного и индуцированного испускания начальными являются состояния i , а для поглощения — состояния f . Предположив в каждом случае все g_i или g_f начальных состояний равновероятными, получим, очевидно, вместо (44,10), следующие соотношения:

$$g_f \omega^{(погл)} = g_i \omega^{(инд)} = g_i \omega^{(сп)} \frac{\pi^2 c^2}{\hbar\omega^3} I. \quad (44,11)$$

В литературе часто используются так называемые коэффициенты Эйнштейна, определяемые как

$$A_{if} = \omega^{(сп)}, \quad B_{if} = \omega^{(инд)} \frac{c}{I}, \quad B_{fi} = \omega^{(погл)} \frac{c}{I} \quad (44,12)$$

(величина I/c есть пространственная спектральная плотность энергии излучения). Они связаны друг с другом соотношениями

$$g_f B_{fi} = g_i B_{if} = g_i A_{if} \frac{\pi^2 c^3}{\hbar\omega^3}. \quad (44,13)$$

63 Взаємодія збудженого атома з квазінеперервним ансамблем мод електромагнітного поля

Розглянемо альтернативну ситуацію, коли моди поля розташовані настільки щільно, що резонансне наближення (тобто виділення взаємодії атома лише з однією або декількома окремими модами) стає принципово неможливим. Для визначення умов існування такої ситуації розглянемо розподіл мод поля по спектру.

Спектральна густина мод в об'ємі V_0 може бути знайдена на підставі таких розрахунків. Як відомо, в квазікласичному наближенні кількість квантованих станів n_i в двовимірному координатно-імпульсному просторі (p_i, q_i) може бути розрахована

на основі формули $\oint p_i dq_i = 2\pi\hbar(n_i + 1/2)$

З цієї формули видно, що при зміні характеру руху частинок зміна двовимірному фазового об'єму $\oint p_i dq_i$ може відбуватись тільки на дискретну величину, кратну $2\pi\hbar$, тобто $\delta(\oint p_i dq_i) = 2\pi\hbar$. Ця величина $2\pi\hbar$ є своєрідним квантом двовимірному фазового об'єму, який відповідає одиничному збудженню системи.

Якщо у нас є система з двовимірним фазовим об'ємом $\Delta p_i \Delta q_i$, то кількість можливих станів частинки n_i в цьому об'ємі можна знайти, розділивши його на величини кванту $2\pi\hbar$ і тоді $n_i = \Delta p_i \Delta q_i / 2\pi\hbar$ (42)

При наявності виродження кількість можливих станів збільшується на параметр спінового або поляризаційного виродження системи g . У випадку тривимірному координатного простору, з яким зв'язаний тривимірний імпульсний простір, повне число можливих квантованих станів в шестивимірному просторово-імпульсному просторі знаходиться за формулою, $n = g \int d^3 p \int d^3 q / (2\pi\hbar)^3$, (43) яка є узагальненням двовимірному випадку.

Якщо ми розглядаємо стани, які відповідають електромагнітному полю, в якому імпульси фотонів зв'язані з хвилевим вектором співвідношенням $p_i = \hbar k_i$, то відповідна дискретність зміни

двовимірному фазового об'єму рівна $\delta(\oint k_i dq_i) = 2\pi$. В цьому

випадку повне число можливих квантованих станів електромагнітного поля в об'ємі квантування $\int d^3q = V_0$ з урахування двох можливих станів поляризації плоских хвиль ($g=2$) знаходиться за формулою $n = 2 \int d^3k \int d^3q / (2\pi)^3 = (V_0/\pi^2) \int k^2 dk = (V_0/\pi^2 c^3) \int \omega^2 d\omega$ (44)

З останнього виразу може бути знайдена спектральна густина станів квантованого поля (спектральна густина мод поля, або, інакше кажучи, кількість мод поля різної частоти в об'ємі квантування V_0 , які відповідають одиничному частотному інтервалу) $dn/d\omega = \rho(\omega) = V_0 \omega^2 / \pi^2 c^3$ (45) Обернена величина $d\omega/dn = 1/\rho(\omega) = \pi^2 c^3 / V_0 \omega^2 = \delta\omega$ (46) має зміст міжмодової відстані $\delta\omega$ - спектрального інтервалу між двома сусідніми по частоті модами в даному об'ємі V_0 , причому напрямок поширення цих сусідніх мод поля може бути довільним. Видно, що у вільному просторі (при $V_0 \rightarrow \infty$) міжмодова відстань $\delta\omega$ прямує до нуля, а спектральна густина, відповідно, стає нескінченно великою при будь якій частоті поля ω . Ця обставина, крім іншого означає, що у вільному просторі принципово неможливо "організувати або забезпечити" селективну взаємодію атома з декількома дискретними модами будь-якої (навіть найменшої) частоти.

В той же час при квантуванні поля в скінчених (по об'єму) системах (наприклад у резонаторі поля НВЧ) міжмодова відстань є досить великою. Наприклад, в резонаторі з об'ємом $V_0 = 10^3 \text{ см}^3$ і при довжині хвилі НВЧ поля $\lambda = 5 \text{ см}$ ($\omega \approx 3,5 \cdot 10^{10} \text{ с}^{-1}$) міжмодова відстань рівна $\delta\omega \approx 3 \cdot 10^8 \text{ с}^{-1}$.

Доцільно нагадати, що спектральна ширина моди в резонаторі з добротністю Q рівна $\Delta\omega \approx \omega/Q$. Порівняємо цю величину з міжмодовою відстанню $\delta\omega$.

Наприклад, при реальній величині добротності $Q=10^3-10^4$ НВЧ резонатора спектральна ширина моди $\Delta\omega \approx 3,5 \cdot (10^7-10^6) \text{ с}^{-1}$. Видно, що в цьому випадку дискретно розташовані моди мають спектральну ширину $\Delta\omega$ в 10-100 разів меншу, ніж міжмодова відстань $\delta\omega$ і, внаслідок цього, принципово можлива селекція мод та взаємодія атома з однією або декількома (2 або 3) найближчими модами.

Принципово інша ситуація відповідає оптичному діапазону. Якщо розглянути такий же за об'ємом V_0 оптичний резонатор (наприклад, у формі паралелепіпеда з дзеркальними поверхнями), то при довжині хвилі електромагнітного поля $\lambda = 1$ мкм ($\omega \approx 2 \cdot 10^{15}$ с⁻¹) міжмодова відстань рівна малій величині $\delta\omega \approx 0,075$ с⁻¹. При типовій для оптичних резонаторів добротності $Q=10^6$ - 10^7 спектральна ширина моди на багато порядків більша і рівна $\Delta\omega \approx 2 \cdot (10^9$ - $10^8)$ с⁻¹ і $\Delta\omega \gg \delta\omega$.

Такий же висновок (квазінеперервний характер частотного розподілу мод квантованого поля в високочастотній області спектру електромагнітних хвиль) випливає і з загальної формули для відношення ширини моди до міжмодового інтервалу $\Delta\omega/\delta\omega \approx V_0\omega^3/\pi^2c^3Q \sim \omega^3$

На перший погляд здається, що при різкому зменшенні об'єму резонатора (при $V_0 \rightarrow 0$) можна досить легко здійснити таке "розрідження мод", яке забезпечить селективну взаємодію атома з однією або декількома дискретно розташованими модами і дозволяє, як це показано вище, подавити спонтанний розпад атома.

Легко впевнитись, що перехід до малорозмірних резонаторів з метою такої оптимізації вимагає забезпечення дуже жорстких умов. Згадаємо, що добротність замкнутого резонатора $Q = W/\Delta W$ визначається відношенням запасеної в ньому енергії W (яка пропорційна об'єму резонатора V_0) до втрат цієї енергії ΔW за один період коливань поля $T=2\pi/\omega = c/\lambda$.

Наприклад, у випадку резонатора в формі дзеркального куба втрати енергії (в наближенні класичного електромагнітного поля) за період коливань за рахунок неповного відбивання електромагнітного поля (з коефіцієнтом $R<1$) від стінок рівні величині

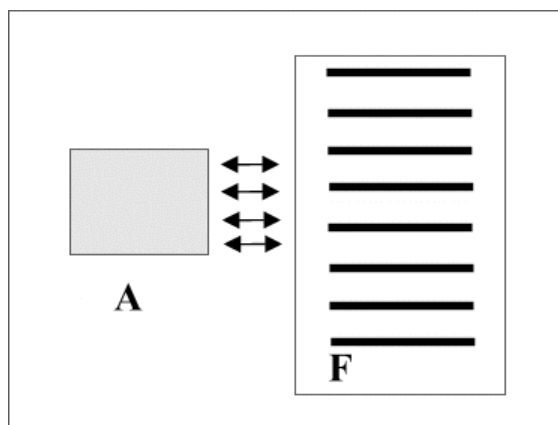
$$\Delta W \approx 2\lambda W(1-R)/V_0^{1/3}, \text{ що відповідає добротності резонатора } Q \approx V_0^{1/3}/2\lambda(1-R).$$

Видно, що при зменшенні об'єму резонатора його добротність спадає. Якщо у випадку типового оптичного макроскопічного

резонатора з об'ємом $V_0=10^3 \text{ см}^3$ і з коефіцієнтом відбивання $R=0,99$ добротність на частоті $\omega = 2 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$ дорівнює $Q \approx 5 \cdot 10^6$, то при зменшенні об'єму резонатора до $V_0 = 10^{-3} \text{ см}^3$ добротність спадає до $Q \approx 5 \cdot 10^4$. Подібні оцінки відповідають також резонаторам іншої (не в вигляді куба) форми.

Враховуючи цей ефект спаду добротності при зменшенні об'єму резонатора маємо інший закон для відношення ширини моди до міжмодового інтервалу $\Delta\omega/\delta\omega \approx 16\pi(1-R)V_0^{2/3}/\lambda^2$ (47)

З останньої формули видно, що умова селективної взаємодії з окремими модами $\Delta\omega < \delta\omega$ можлива тільки при умові $V_0^{2/3} \approx \lambda^2$ і при збереженні високого коефіцієнту відбивання $R=0,99$, а це відповідає такому резонатору, у якого лінійний розмір $L = V_0^{1/3}$ приблизно рівний довжині електромагнітної хвилі λ . Очевидно, що створення об'ємного резонатора з лінійними розмірами не більше 1 мкм і з тим же великим коефіцієнтом відбивання $R=0,99$ є дуже складною технічною задачею.



Таким чином, для випадку оптичних та більш короткохвильових переходів практично неможливо розрізнити моди і реалізувати взаємодію атома з однією модою, або з їх малою кількістю. Ця ситуація якісно зображена на рис.5.

Аналіз задачі тепер треба робити, виходячи з загального розв'язку (21).

$$A(t) = A(0)(2\pi i)^{-1} \int_{-\infty-i\delta}^{\infty-i\delta} \exp(i\omega t) d\omega / \left\{ \omega - \sum_{\beta} \frac{|V_{\alpha\beta}|^2 / \hbar^2 (\omega_{\beta} + \omega - \omega_{\alpha})}{\omega - \omega_{\beta}} \right\} \quad (21)$$

Розглянемо суму

$$S = \sum_{\beta} |V_{\alpha\beta}|^2 / \hbar^2 (\omega_{\beta} + \omega - \omega_{\alpha}),$$

що стоїть в знаменнику (21) і характеризує зв'язок між атомом та всім ансамблем мод. Цю суму S можна обрахувати, якщо перейти від процедури знаходження суми вкладів її членів $|V_{a\beta}|^2/\hbar^2(\omega_\beta+\omega-\omega_a)$, які описують взаємодію з усіма щільно розташованими модами, до процедури усереднення та інтегрування цієї величини $\langle |V_{a\beta}|^2 \rangle / \hbar^2(\omega_\beta+\omega-\omega_a)$ по всім можливим частотам ω_β мод з використанням спектральної густини станів $\rho(\omega_\beta)$ квантованого поля та з урахуванням їх виродження в об'ємі квантування:

$$S = \int_0^\infty \rho(\omega_\beta) \langle |V_{a\beta}|^2 \rangle d\omega_\beta / \hbar^2(\omega_\beta+\omega-\omega_a) = \int_0^\infty \langle |V_{a\beta}|^2 \rangle (V_0/\pi^2 c^3 \omega_\beta^2) d\omega_\beta / \hbar^2(\omega_\beta+\omega-\omega_a) \quad (48)$$

В дипольному наближенні величина $\langle |V_{a\beta}|^2 \rangle$ може бути знайдена на основі формули (11). $V_{eg(\beta)} = \int \psi_e^*(\vec{r}) (-\vec{d}\vec{E}_\beta) \psi_g(\vec{r}) d^3r = -i(2\pi\hbar\omega_\beta/V_0)^{1/2} (\vec{d}_{eg}\vec{e}_\beta) \exp[-i(\vec{k}_\beta\vec{r}_a + \varphi_\beta)]$ (11) Тут \vec{r}_a - координата центру атома; \vec{d}_{eg} - матричний елемент дипольного моменту атома, який відповідає конкретному переходу атома з збудженого стану "e" в основний стан "g" з одночасним збудженням моди поля β .

Вона також може бути обрахована, виходячи з приведених нижче простих оцінок. Енергія взаємодії з атомом однієї моди

квантованого електромагнітного поля $\vec{E}_\beta(\vec{r}, t)$, яка знаходиться в вакуумному стані і має енергію $\hbar\omega_\beta/2$, визначається стандартним виразом

$$V = -\vec{d}\vec{E}_\beta = -(\vec{d}\vec{e}_k) E_\beta$$

В цьому співвідношенні $\vec{d} = e\vec{r}$ є дипольним моментом атома, а величина \vec{e}_k є одиничним вектором поляризації моди.

Після знаходження матричних елементів та формальної процедури усереднення маємо $\langle |V_{\alpha\beta}|^2 \rangle = \langle | \vec{d}_{eg} \vec{e}_k |^2 \rangle \langle |E_\beta|^2 \rangle$ Величину $\langle |E_\beta|^2 \rangle$ можна знайти, якщо врахувати, що повна енергія моди $\hbar\omega_\beta/2$ визначається добутком середньої густини енергії електромагнітного поля $w_E = \langle |E_\beta|^2 \rangle / 4\pi$ на об'єм моди V_0 . В результаті маємо $\langle |E_\beta|^2 \rangle = 2\pi\hbar\omega_\beta/V_0$. Після просторового усереднення

$$\langle | \vec{d}_{eg} \vec{e}_k |^2 \rangle = | \vec{d}_{eg} |^2 \langle \cos^2 \theta \rangle_{4\pi} = | \vec{d}_{eg} |^2 / 3$$

знаходимо остаточний вираз для $\langle |V_{\alpha\beta}|^2 \rangle$ $\langle |V_{\alpha\beta}|^2 \rangle = | \vec{d}_{eg} |^2 2\pi\hbar\omega_\beta/3V_0$. Такий самий вираз можна безпосередньо отримати з (11). З урахуванням явного виразу величини $\langle |V_{\alpha\beta}|^2 \rangle$ сума (48)

$$\text{приймає вигляд } S = (2/3\pi\hbar c^3) \int_0^\infty | \vec{d}_{eg} |^2 \omega_\beta^3 d\omega_\beta / (\omega_\beta + \omega - \omega_a) \quad (48a)$$

Додатково перетворимо цей вираз з врахуванням ще однієї дуже важливої обставини.

Збіжність інтегралу в виразі (48a) забезпечується тим, що матричний елемент $\vec{d}_{eg}(\omega_\beta)$ з зростанням різниці $|\omega_\beta - \omega_a| \rightarrow \infty$ спадає по експоненціальному закону. Цей спад значно істотніший і швидший, ніж зростання степеневі функції ω_β^3 в чисельнику підінтегрального виразу при $\omega_\beta \rightarrow \infty$. В наявності такого експоненціального спаду легко переконатися, коли згадати правило отримання дипольного наближення в теорії взаємодії електромагнітного поля з атомами. Воно полягає в нехтуванні зміною фази в виразі

$$\exp\{\pm i(\vec{k}_\beta \vec{r} - (\omega_\beta - \omega_a)t)\} \equiv \exp\{\pm i(\omega_\beta (\vec{r} \vec{k}_\beta / k_\beta) / c - (\omega_\beta - \omega_a)t)\}$$

(який входить у вигляді підінтегрального множника при обрахуванні енергії взаємодії атома з полем) в межах атома і заміною його 1. Очевидно, що так можна поступати тільки в тому випадку, коли частота поля задовольняє одночасно двом умовам: 1) виконується умова $|\omega_\beta - \omega_a|t \ll \pi$ квазірезонансної взаємодії атома з модами поля. В протилежному випадку (при $|\omega_\beta - \omega_a|t > \pi$)

підінтегральний вираз стає швидко осцилюючою функцією частоти ω_β , що приводить до дуже швидкого спадання енергії взаємодії атома з конкретними модами поля.

2) виконується умова $|\omega_\beta (\vec{r}k_\beta/k_\beta)/c| \ll 1$, яка може бути задоволена, коли частота поля ω_β , яка є змінною інтегрування, обмежена максимальним значенням $|\omega_\beta| \ll c/a$ (де a є ефективний розмір атома). Очевидно, що в протилежному випадку $|\omega_\beta| \gg c/a$ (що має місце при формальному розширенні меж інтегрування $|\omega_\beta| \rightarrow \infty$ в процесі обрахування комплексного інтегралу в виразі (48а) для функції S) цей фазовий множник стає швидко осцилюючою функцією частоти, що веде до експоненціальної мализни енергії взаємодії.

Виходячи з цих умов стає очевидним, що межі інтегрування в (48а) можна розширити до інтервалу $[-\infty, \infty]$, що дозволяє записати (48а) в остаточному вигляді

$$S = (2/3\pi\hbar c^3) \int_{-\infty}^{\infty} |\vec{d}_{eg}|^2 \omega_\beta^3 d\omega_\beta / (\omega_\beta + \omega - \omega_a) \quad (49)$$

Дуже важливим є та обставина, що цей вираз (а разом з ним і вирази для амплітуди $A(t)$ (21) та ймовірності збудженого стану атома $W(t) = |A(t)|^2$) не залежить від величини об'єму квантування V_0 .

У випадку радіаційних переходів більш високої мультипольності (наприклад, квадрупольного з параметром мультипольності $L=2$, октупольного ($L=3$) і інших), в цій формулі необхідна стандартна заміна матричного елемента $\vec{d}_{a\beta}$ дипольного моменту \vec{d} атома на відповідний матричний елемент $\vec{Q}_{a\beta}^{(L)}$ мультипольного моменту

$$|\vec{d}_{a\beta}|^2 \rightarrow \{6\pi(L+1)/L[(2L+1)!!]^2\} (\omega_{a\beta}/c)^{2L-2} |\vec{Q}_{a\beta}^{(L)}|^2, L > 1 \quad (50)$$

Інтеграл (49) можна обрахувати за допомогою комплексного інтегрування. Спочатку відмітимо, що кінцевий вираз для досліджуваної величини $A(t)$ визначається, як це видно з структури підінтегрального виразу (21), полюсами цього підінтегрального

виразу при одній або декількох значеннях комплексної частоти $\omega = \omega' + i\omega''$. Очевидно, що положення цих полюсів, які визначають часову зміну амплітуди ймовірності $A(t)$ знаходження атома в збудженому стані, характеризуються малими значеннями ω в порівнянні з частотою ω_a , яка визначає часову зміну самої хвильової функції (ця обставина безпосередньо впливає з представлення (13)).

В математичній фізиці показано, що функція $(\omega_\beta - \omega_a + \omega)^{-1}$ аргументу $(\omega_\beta - \omega_a)$, яка входить в склад підінтегрального виразу в (49), у випадку малізми комплексної величини ω веде себе подібно до δ -функції і її можна представити у вигляді $(\omega_\beta - \omega_a + \omega' + i\omega'')^{-1} = \pi i \delta(\omega_\beta - \omega_a + \omega') + \hat{P} (\omega_\beta - \omega_a + \omega')^{-1}$, (51) в якому

оператор \hat{P} визначає обрахування головного значення інтегралу по Коші.

Використовуючи представлення (51) і приймаючи до уваги, що в загальному вигляді матричний елемент $\vec{d}_{eg} \equiv \vec{d}_{eg}(\omega_\beta)$ є функцією частоти ω_β , величина S (структура якої представлена в (48) та (49)) легко обраховується і приймає остаточно вигляд

$S = i\Gamma_0/2 + \Delta\omega_0$, (52) в якому дійсна та уявні частини мають вигляд

$$\Gamma_0/2 = 2(\omega_a - \omega')^3 | \vec{d}_{eg}(\omega_a - \omega') |^2 / 3\hbar c^3 \approx 2\omega_a^3 | \vec{d}_{eg}(\omega_a) |^2 / 3\hbar c^3, (53)$$

$$\Delta\omega_0 = \hat{P} \int_0^\infty 2\omega_\beta^3 | \vec{d}_{eg}(\omega_\beta) |^2 d\omega_\beta / 3\pi\hbar c^3 (\omega_\beta - \omega_a + \omega') \approx$$

$$\hat{P} \int_0^\infty 2\omega_\beta^3 | \vec{d}_{eg}(\omega_\beta) |^2 d\omega_\beta / 3\pi\hbar c^3 (\omega_\beta - \omega_a). (54)$$

Вище було показано, що частота ω є малою величиною в порівнянні з частотою ω_a . Внаслідок цього в останніх виразах ми знехтували малою дійсною величиною ω' .

Таким чином, вираз для знаходження закону спонтанного розпаду збудженого атома приймає остаточно вигляд

$$A(t) = A(0)(2\pi i)^{-1} \int_{-\infty-i\delta}^{\infty-i\delta} \exp(i\omega t) d\omega / \{\omega - i\Gamma_0/2 - \Delta\omega_0\} \quad (55)$$

Параметри розпаду збудженого стану атома (час життя та радіаційний зсув рівня) визначаються положенням єдиного полюса $\omega = i\Gamma_0/2 + \Delta\omega_0$ підінтегральної функції в верхній півплощині комплексних частот і обраховуються за допомогою знаходження лишка в полюсі підінтегрального виразу (55)

$A(t) = A(0) \exp[(-\Gamma_0/2 + i\Delta\omega_0)t]$ (56) Якщо згадати, що повна хвильова функція атома, що відповідає збудженому стану, згідно з принципом суперпозиції (13) має вигляд

$\psi_e(\vec{r}, t) = A(t) \psi_{a0}(\vec{r}) \exp(-iE_a t/\hbar)$, то хвильова функції повної системи (атом + поле) в збудженому стані атома приймає остаточний вигляд

$$\psi_e(\vec{r}, t) = A(0) \psi_a(\vec{r}_A) \varphi_{\{0,0,\dots,0\}}(\vec{q}) \exp\{-\Gamma_0/2 - i(E_a/\hbar - \Delta\omega_0)t\} \quad (57)$$

Видно, що в такій системі енергія збудженого стану атома не рівна власному значенню оператора Гамільтона атома E_a (як це було б при відсутності взаємодії між атомом та полем), а характеризується радіаційним (польовим) зсувом $\Delta\omega_0$ (зсув Лемба) відносно E_a . Причиною цього зсуву є процес взаємодії атома з модами поля, а величина зсуву залежить як від характеристик атома, так і від властивостей поля.

Наприклад, у випадку атомів водню експериментальне значення зсуву Лемба складає:

$$\Delta\omega_0 \text{ (для рівня } 2s_{1/2}) = 1034 \text{ Мгц,}$$

$$\Delta\omega_0 \text{ (для рівня } 2p_{1/2}) = -17 \text{ Мгц,}$$

$$\Delta\omega_0 \text{ (для рівня } 2p_{3/2}) = 8 \text{ Мгц.}$$

Для більш важких атомів цей зсув істотно збільшується:

$$\Delta\omega_0 \text{ (для рівня } 2s_{1/2} \text{ гелію)} = 14063 \text{ Мгц,}$$

$$\Delta\omega_0 \text{ (для рівня } 2s_{1/2} \text{ літію)} = 62765 \text{ Мгц,}$$

$$\Delta\omega_0 \text{ (для рівня } 2s_{1/2} \text{ вуглецю)} = 221500 \text{ Мгц.}$$

Нарешті, знайдемо ймовірність знаходження атома в збудженому стані і визначимо час життя такого стану.

З (47) знаходимо вирази для процесу спонтанного розпаду атома

$W(t) = |A(t)|^2 = \exp(-t/\tau)$ (58) та для нормованої ймовірності такого процесу $|dW(t)/dt|/W(t) = \Gamma_0$. (59) В цих виразах величина $\tau = 1/\Gamma_0 = 3\hbar c^3/4\omega_a^3 |\vec{d}_{eg}(\omega_a)|^2$ є час життя збудженого атома по відношенню до радіаційного розпаду (це є той час, за який ймовірність атома залишатись у збудженому стані зменшується в $e \approx 2,7$ разів).

65 Явища релятивізму як мала поправка до нерелятивістських рівнянь КМ (квантової механіки).

Запишемо рівняння Шредінгера: $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right)\Psi = E\Psi$ або $\left(\frac{p^2}{2m} + V\right)\Psi = E\Psi$

або $(\hat{T} + \hat{V})\Psi = E\Psi$. Релятивістський вираз для енергії

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} + V = V + mc^2 \sqrt{1 + \frac{p^2c^2}{m^2c^4}} = \\ &= V + mc^2 \left(1 + \frac{p^2c^2}{2m^2c^4} - \frac{1}{8} \frac{p^4c^4}{m^4c^8}\right) = V + mc^2 + \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4c^4}{8m^3c^6}. \end{aligned}$$

Введемо енергію

$E = \varepsilon - mc^2$; отримаємо $E = \frac{p^2}{2m} + V - \frac{p^4}{8m^3c^2}$. Перейдемо від

гамільтоніану $\hat{H}_0 = \frac{p^2}{2m} + V$ до $\hat{H}_1 = \hat{H}_0 - \frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2}$; доданок $-\frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2} = \hat{U}$

вважатимемо збуренням. З теорії збурень $\Delta E = \langle \hat{U} \rangle$.

$$\Delta E_{n\ell m} = \int \Psi_{n\ell m}^* \left(-\frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2}\right) \Psi_{n\ell m} dV$$

. Квадрат оператора імпульсу

$$\hat{p}^2 = 2m(\hat{H}_0 - \hat{V}); \text{ тоді } \Delta E_{n\ell m} = -\int \Psi_{n\ell m}^* \frac{4m^2}{8m^3c^2} (\hat{H}_0 - \hat{V}) \underbrace{(\hat{H}_0 - \hat{V}) \Psi_{n\ell m}}_{=(E_n - V)\Psi_{n\ell m}} dV \quad (\text{ТУТ ВЗЯТО})$$

потенціал $V = -\frac{Ze^2}{r}$). Тоді $\Delta E_{n\ell m} = -\frac{1}{2mc^2} \int \Psi_{n\ell m}^* (\hat{H}_0 - \hat{V}) (E_n - V) \Psi_{n\ell m} dV$. 3

$$\text{умови ермітовості } \Delta E_{n\ell m} = -\frac{1}{2mc^2} \int (E_n - V) \Psi_{n\ell m} (\hat{H}_0 - \hat{V})^* \Psi_{n\ell m}^* dV =$$

$$= -\frac{1}{2mc^2} \int \Psi_{n\ell m}^* (E_n - V)^2 \Psi_{n\ell m} dV = -\frac{1}{2mc^2} \int \Psi_{n\ell m}^* (E_n^2 - 2E_n V + V^2) \Psi_{n\ell m} dV =$$

$$= -\frac{1}{2mc^2} \left\{ E_n^2 - 2E_n \left\langle -\frac{Ze^2}{r} \right\rangle_{n\ell m, n\ell m} + (Ze^2)^2 \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{n\ell m, n\ell m} \right\}. \text{ Як відомо}$$

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{Z}{n^2 a_B}; \quad \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{Z^2}{n^3 a_B^2 (\ell + 1/2)}, \text{ де } a_B = \frac{\hbar^2}{me^2} - \text{Борівський радіус. Тоді}$$

$$\Delta E_{n\ell m} = -\frac{1}{2mc^2} \left\{ E_n^2 + 2E_n \frac{Ze^2Z}{n^2 a_B} + \frac{Z^2 e^4 Z^2}{n^3 a_B^2 (\ell + 1/2)} \right\} = -\frac{E_n^2}{2mc^2} \left(3 - \frac{4n}{\ell + 1/2} \right), \text{ де}$$

$$E_n = -\frac{Z^2 e^4 m}{n^2 \hbar^2}. \text{ Таким чином, в цій задачі ми замість } E_n \text{ отримали}$$

вираз
$$E_n \left(1 + \frac{E_n^2}{2mc^2} \left(3 - \frac{4n}{\ell + 1/2} \right) \right).$$

_____ ↓ Максимальне значення $\ell_{\max} = n - 1$, тому для всіх

_____ ↓ ℓ буде виконуватись нерівність $\frac{4n}{\ell + 1/2} > 4$.

_____ ↓ Оскільки $E_n < 0$, то рівні будуть зсуватись вниз; крім

того, при цьому знімається виродження по ℓ . Це еквівалентно збільшенню ефективної маси електрона.

66 Явища релятивізму як мала поправка до нерелятивістських рівнянь в квантовій механіці.

$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right)\psi = E\psi$ - є нерелятивістським, бо відсутня залежність від

швидкості світла; або $\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V\right)\psi = E\psi$; або

$$\left(\vec{T} + \vec{V}\right)\psi = E\psi \quad \varepsilon = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} + V = V + mc^2\sqrt{1 + \frac{p^2}{m^2c^4}} \approx$$

$$V + mc^2\left(1 + \frac{p^2c^2}{2m^2c^4} - \frac{1}{8}\frac{p^4c^4}{m^4c^8}\right) = V + mc^2 + \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2};$$

Ввівши енергію $E = \varepsilon - mc^2 = \frac{p^2}{2m} + V - \frac{p^4}{8m^3c^2}$ - додатковий вклад енергії, що виникає при врахуванні релятивізму, переходимо від

$$\hat{H}_0 = \frac{p^2}{2m} + V \rightarrow \text{до } \hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{p^4}{8m^3c^2}; \text{ Будемо вважати } \vec{U} = \frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2} \text{ - як}$$

збурення. У теорії збурень $\Delta E = \langle U \rangle$. $\Delta E_{nlm} = \langle U \rangle =$

$$\int \psi_{nlm}^* \left(-\frac{p^4}{8m^3c^2}\right) \psi_{nlm} d\tau; \quad \text{Визначимо } p^2 = 2m(\hat{H}_0 - V);$$

$$\Delta E_{nlm} = -\int \Psi_{nlm}^* \frac{4m^2}{8m^3c^2} (\hat{H}_0 - V) (\hat{H}_0 - V) \Psi_{nlm} d\tau$$

$$= -\frac{1}{2mc^3} \int \Psi_{nlm}^* (\hat{H}_0 - V) (\hat{H}_0 - V) \Psi_{nlm} d\tau = \left| \left(\hat{H}_0 \right) \Psi_{nlm} = (E_n - V) \Psi_{nlm}, \right| = \left| V = \frac{ze^2}{r} \right| =$$

$$-\frac{1}{2mc^3} \int \psi_{nlm}^* (\hat{H}_0 - V) (E_n - V) \psi_{nlm} d\tau = \text{використаємо умову ермітовості}$$

$$= -\frac{1}{2mc^3} \int (E_n - V) \psi_{nlm} (\hat{H}_0 - V)^* \psi_{nlm}^* d\tau =$$

$$-\frac{1}{2mc^3} \int \psi_{nlm}^* (E_n - V)^2 \psi_{nlm} d\tau =$$

$$-\frac{1}{2mc^3} \left\{ E_n^2 - 2E_n \left(-ze^2 \right) \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nlm, nln} + (ze^2)^2 \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nlm, nln} \right\}$$

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{z}{n^2 \alpha}; \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{z^2}{n^3 \left(\ell + \frac{1}{2} \right) \alpha^2}; \alpha = \frac{\hbar^2}{m e^2}. \text{ Тоді}$$

$$\Delta E_{nlm} = -\frac{1}{2mc^2} \left\{ E_n^2 + 2E_n z e^2 \frac{z}{n^2 \alpha} + \frac{z^2 e^4 z^2}{n^3 \left(\ell + \frac{1}{2} \right) \alpha} \right\}; \quad E_n = -\frac{z e^4 m}{n^2 \hbar^2}; \text{ Отже,}$$

$$\Delta E_{nlm} = \frac{E_n^2}{2mc^2} \left(3 - \frac{4n}{\ell + \frac{1}{2}} \right) \Rightarrow E_n \rightarrow E_n \left(1 + \frac{E_n}{2mc^2} \left(3 - \frac{4n}{\ell + \frac{1}{2}} \right) \right). \quad \ell_{\max} = n - 1,$$

отже $\frac{4n}{n-1+\frac{1}{2}} > 4$, тому оскільки $E_n < 0$, то рівні будуть зсуватися

вниз і при цьому знімається виродження по ℓ за рахунок відцентрової сили на р і d орбіталях. Це еквівалентно збільшенню ефективної маси електрона.

69 4-Імпульс та 4-потенціал. Релятивістське рівняння Клейна-Гордона-Фока (КГФ).

Рівняння Шредінгера
$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \Psi$$
 в релятивістському випадку має бути релятивістськи інваріантним, тобто час і простір повинні входити в нього з однаковим порядком похідних по ним.

$$\hat{\varepsilon} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}; \hat{p} = -i\hbar \nabla; \varepsilon^2 = m^2 c^4 + p^2 c^2 \quad . \text{З цих співвідношень випливає:}$$

$$\varepsilon^2 \Psi = (p^2 c^2 + m^2 c^4) \Psi \quad \text{або} \quad -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi = (-\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4) \Psi \quad \text{або}$$

$$(p^2 c^2 - \varepsilon^2) \Psi = -m^2 c^4 \Psi \quad . \text{Введемо 4-вектор імпульсу:}$$

$$p_\mu = \left(i \frac{\varepsilon}{c}; \vec{p} \right); \mu = 0, 1, 2, 3; p_0 = i \frac{\varepsilon}{c} \quad . \text{Тоді рівняння набуде вигляду:}$$

$$\left(\sum_{\mu=0}^3 p_\mu^2 c^2 + m^2 c^4 \right) \Psi = 0 \quad - \text{в такому вигляді воно вже є релятивістськи}$$

інваріантним. Враховуючи комплексно спряжене, ми маємо два

$$\text{рівняння:} \quad \begin{cases} -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = (-\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4) \Psi \Big| \cdot \Psi^* \\ -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial t^2} = (-\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4) \Psi^* \Big| \cdot \Psi \end{cases} \quad . \text{Помноживши їх відповідно}$$

на Ψ^* та Ψ і віднявши, отримаємо:

$$-\hbar^2 \left(\Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} - \Psi \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial t^2} \right) = -\hbar^2 c^2 (\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^*), \quad \text{звідки}$$

$$-\hbar^2 \frac{\partial}{\partial t} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) = -\hbar^2 c^2 \nabla (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \quad . \text{Введемо вектор густини}$$

$$\text{потoku} \quad \vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi); \quad \text{тоді}$$

$$\hbar^2 c^2 \nabla \left(\frac{i\hbar}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \right) = -\hbar^2 \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial t} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right); \text{ отже,}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{i\hbar}{2mc^2} \left(\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) \right) + \nabla \vec{j} = 0 \quad . \text{ Введемо позначення}$$

$$\rho = \frac{i\hbar}{2mc^2} \left(\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right), \text{ тоді } \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \vec{j} = 0 \right]. \text{ Розглянемо вплив зовнішніх}$$

полів. Нехай $A_\mu = (iA_0; \vec{A})$, де $A_0 = \phi$ - 4-вектор потенціалу.

Перейдемо до нового імпульсу з урахуванням \vec{A} : $\vec{p} \rightarrow \vec{P} = \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}$.

$$\text{Тоді } (p^2 c^2 - \varepsilon^2) \Psi = -m^2 c^4 \Psi \quad \text{або} \quad \left(\sum_{\mu=0}^3 \left(p_\mu - \frac{e}{c} A_\mu \right)^2 c^2 + m^2 c^4 \right) \Psi = 0 \quad . \text{ Тоді}$$

$$\left\{ \left(p_0 - \frac{e}{c} A_0 \right)^2 c^2 + \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 c^2 + m^2 c^4 \right\} \Psi =$$

$$= \left\{ \left(i \frac{\varepsilon}{c} - i \frac{e}{c} \phi \right)^2 c^2 + \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 c^2 + m^2 c^4 \right\} \Psi =$$

$$= \left\{ -(\varepsilon + e\phi)^2 + \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 c^2 + m^2 c^4 \right\} \Psi = 0 \quad . \text{ Звідси}$$

$$\left(\varepsilon + e\phi \right)^2 \Psi = \left\{ \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 c^2 + m^2 c^4 \right\} \Psi \quad - \text{стаціонарне рівняння КГФ. 3}$$

урахуванням $\hat{\varepsilon} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}; \hat{p} = -i\hbar \nabla$ отримуємо

$$\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + e\phi \right)^2 \Psi = \left\{ \left(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 c^2 + m^2 c^4 \right\} \Psi \quad - \text{нестационарне рівняння КГФ.}$$

70 Рівняння Клейна-Гордона-Фока

Тут використані наступні позначення: $\partial \equiv \partial$, $(\sum_{\mu=0}^3 \equiv \sum_{\mu=0}^3$

Запишемо рівняння Шредінгера $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = (-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + v)\psi$ - це рівняння нам не підходить в релятивістському випадку. Розглянемо вільний

простір $\mathbf{V}=\mathbf{0}$, де $\varepsilon = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$ (1) з іншого боку $\varepsilon = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ (1.2) та

$p = -i\hbar \nabla$ (1.3) підведемо (1) до квадрату та подіємо на нього

оператором, тоді $\varepsilon^2 \psi = (p^2 c^2 + m^2 c^4) \psi$ звідси

$$-\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = (-\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4) \psi \quad \text{або з іншого боку} \quad (p^2 c^2 - \varepsilon^2) \psi = -m^2 c^4 \psi .$$

Введемо чотиривимірний імпульс $p = \{\bar{p}, i \frac{\varepsilon}{c}\}$ тоді можна записати

$$(\sum_{\mu=0}^3 p_{\mu}^2 c^2 + m^2 c^4) \psi = 0 \quad (2) \quad \text{Нехай тепер присутнє зовнішнє поле тоді від}$$

імпульсу частинки переходимо до узагальненого імпульсу

$$\bar{p} \rightarrow \bar{P} = \bar{p} - \frac{e}{c} \bar{A} \quad \text{де } \bar{A} \quad (\text{векторний потенціал}) \quad \text{теж має}$$

чотиривимірний вигляд з такими компонентами $A = \{\bar{A}, iA_0\}$ тоді (2)

можна переписати с вигляді $(\sum_{\mu=0}^3 (P_{\mu} - \frac{e}{c} A_{\mu})^2 c^2 + m^2 c^4) \psi = 0$ - це рівняння

Клейна-Гордона-Фока в чотиривимірній формі . Перепишучи це

рівняння покомпоненто маємо $((P_0 - \frac{e}{c} A_0)^2 c^2 + (\bar{P} - \frac{e}{c} \bar{A})^2 c^2 + m^2 c^4) \psi = 0 \Rightarrow$

$$(-(\varepsilon - e\phi)^2 + (\bar{P} - \frac{e}{c} \bar{A})^2 c^2 + m^2 c^4) \psi = 0 \quad \text{використовуючи (1.2) та (1.3)}$$

$$\Rightarrow (-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + e\phi)^2 \psi = \{(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \bar{A})^2 + m^2 c^4\} \psi \quad \text{- не стаціонарне рівняння}$$

Клейна-Гордона-Фока , де ϕ - скалярний

потенціал. Рівняння Клейна-Гордона-Фока не описує явища пов'язані зі спіном.

Для нерелятивістського випадку енергія виражається формулою

$$\varepsilon = mc^2 + E \text{ маємо } (E + mc^2 + e\phi)^2 \psi = (p^2 c^2 + m^2 c^4) \psi \text{ розділивши рівняння}$$

$$\text{на } - - mc^2 \Rightarrow \{E^2 + 2Emc^2 + m^2c^4 + Ee\phi + 2mc^2e\phi + (e\phi)^2 - p^2c^2 - m^2c^4\} = 0 \Rightarrow$$

$$\left\{ \frac{p^2}{2m} - e\phi - e\phi \frac{E}{mc^2} - \frac{(e\phi)^2}{2mc^2} \right\} \psi = E \left(1 + \frac{E}{2mc^2} \right) \psi \text{ також для нерелятивістський}$$

випадку (малі енергії) повинно виконуватися $E \ll mc^2$ тоді

$$\left\{ \frac{p^2}{2m} - e\phi \left(1 + \frac{E}{mc^2} + \frac{e\phi}{2mc^2} \right) \right\} \psi = E \psi \Rightarrow \left\{ \frac{p^2}{2m} - e\phi \left(1 + \frac{e\phi}{2mc^2} \right) \right\} \psi = E \psi \text{ заряд}$$

від'ємний, тому $e = -|e|; V = -|e|\phi \Rightarrow \left[\frac{p^2}{2m} - e\phi - \frac{(e\phi)^2}{2mc^2} \right] \psi = E \psi$ Отже

виникла поправка до рівняння Шредінгера, причому як бачимо

другий доданок завжди від'ємний. При $e\phi \ll 2mc^2$ рівняння

переходить в звичайне рівняння Шредінгера. При $e\phi > 2mc^2$

введемо деякий ефективний потенціал $V_{\text{eff}} = -e\phi - \frac{(e\phi)^2}{2mc^2}$ тоді рівняння

прийме вигляд $\left[\frac{p^2}{2m} + V_{\text{eff}} \right] \psi = E \psi$ бачимо що в дуже сильному потенціальному полі заряди не залежно від знаку притягуються, тому що другий доданок в ефективному заряді завжди від'ємний

не залежно від знаку заряду. Нехай $\phi = \frac{e}{r}$, тоді $V_{\text{eff}} = \frac{e^2}{r^2} - \frac{e^4}{2mc^2 r^4}$

Розрахунки показали що явище притягування проявляється лише на відстані порядку $r = 1e^{-11}$ [см]

71 Рівняння Дірка

Рівняння Клейна-Гордона-Фока не описує явища пов'язані зі спіном.

Правильне рівняння повинно бути :

1)Лоренц-інваріантним; 2)Лінійним; 3)Першого порядку по просторовим змінним (а значить и по часовим змінним) Отримаємо рівняння яке враховує всі ці властивості.

$\varepsilon = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$ цю формулу необхідно лінеаризувати і в той же час залишити першого порядку по координаті. Введемо імпульс

$p = \{m c, \bar{p}\}$ (це не чотири імпульс!!!!), тоді

$\varepsilon = \sqrt{\sum_{\mu=0}^3 p_{\mu}^2 c^2}$ Чи можна зробити за допомогою певного

математичного об'єкту, так що $\sqrt{\sum_{\mu=0}^3 p_{\mu}^2 c^2} = \sum_{\mu=0}^3 \alpha_{\mu} c p_{\mu}$;

Розглянемо $\varepsilon^2 = \sum_{\mu=0}^3 \sum_{\mu'=0}^3 c^2 p_{\mu}^2 p_{\mu'}^2 \left(\frac{\alpha_{\mu} \alpha_{\mu'} + \alpha_{\mu'} \alpha_{\mu}}{2} \right) \Rightarrow$ з іншого

боку $\varepsilon^2 = \sum_{\mu=0}^3 p_{\mu}^2 c^2$, отже має бути

$\alpha_{\mu} \alpha_{\mu'} + \alpha_{\mu'} \alpha_{\mu} = 2 \delta_{\mu \mu'}; \alpha_{\mu}^2 = 1$ Шукаємо $\hat{\alpha}_{\mu}$ в вигляді матриці

$4 \times 4 \quad \alpha_0 = \begin{vmatrix} (\alpha_0)_{00} & \dots & (\alpha_0)_{03} \\ \dots & \dots & \dots \\ (\alpha_0)_{30} & \dots & (\alpha_0)_{33} \end{vmatrix}$ Підставляючи отримаємо

що $\alpha_1 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & \sigma_x \\ \sigma_x & 0 \end{vmatrix} \quad \alpha_2 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & \sigma_y \\ \sigma_y & 0 \end{vmatrix}$

$$\alpha_3 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & \sigma_z \\ \sigma_z & 0 \end{vmatrix} \quad \alpha_0 \equiv \beta = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix} \quad \text{скорочено}$$

можна записати $\bar{\alpha} = \{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3\} = \begin{vmatrix} 0 & \bar{\sigma} \\ \bar{\sigma} & 0 \end{vmatrix}$ Тобто матриці Дірка складаються з матриць Паулі (в матрицях перехід від чотиривимірних до двовимірних матриць зроблений на основі виразів для $\bar{\sigma}$). Де $\bar{\sigma}$ за визначенням має вигляд

$$\sigma_x = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}; \quad \sigma_y = \begin{vmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{vmatrix}; \quad \sigma_z = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix} \quad (\text{це матриці Паулі}) \quad \text{та} \quad 1 = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}. \quad \text{Тоді}$$

для енергій маємо $\varepsilon = c\bar{\alpha}\bar{p} + \beta mc^2$; $\hat{\varepsilon} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$.

; $\hat{p} \rightarrow -i\hbar \nabla$ $\hat{\varepsilon}\psi = (c\hat{\alpha}\hat{p} + mc^2\beta)\psi \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi = (-i\hbar c\hat{\alpha}\nabla + \beta mc^2)\psi$ - це нестационарне рівняння Дірка за відсутності зовнішнього

поля. Розв'язок треба шукати в вигляді $\psi = \begin{vmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{vmatrix}$ розіб'ємо

ψ на блоки $\phi = \begin{vmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{vmatrix}; \quad \chi = \begin{vmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{vmatrix}$ - біспінори; Просто ψ_i - спінори. Підставивши розв'язок в рівняння :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{vmatrix} \phi \\ \chi \end{vmatrix} = c\hat{p} \begin{vmatrix} 0 & \bar{\sigma} \\ \bar{\sigma} & 0 \end{vmatrix} * \begin{vmatrix} \phi \\ \chi \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix} mc^2 \begin{vmatrix} \phi \\ \chi \end{vmatrix} \quad \text{або}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{vmatrix} \phi \\ \chi \end{vmatrix} = c\hat{p} \bar{\sigma} \begin{vmatrix} \phi \\ \chi \end{vmatrix} + mc^2 \begin{vmatrix} \phi \\ \chi \end{vmatrix}; \Rightarrow$$

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = c\hat{p} \bar{\sigma} \phi + mc^2 \phi \\ i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = c\hat{p} \bar{\sigma} \chi + mc^2 \chi \end{cases} \quad (1) - \text{чотири рівняння (}$$

лінійних, першого порядку) , в кожному з яких є всі чотири

функцій. Введемо густину ймовірності

$$\rho = \sum_{\mu=1}^4 |\psi_{\mu}|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + |\psi_3|^2 + |\psi_4|^2 \geq 0$$

(Це можна

довести). Для того щоб система (1) мала не тривіальний розв'язок, треба щоб детермінант був рівним нулеві, тоді

$$\det = 0 \Rightarrow [\varepsilon^2 - (p^2 c^2 + m^2 c^4)]^2 = 0 \Rightarrow \varepsilon = \pm \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} \quad \text{Енергія}$$

частинки, що описується рівняння Дірака може бути як додатною так і від'ємною. Перший біспінор – описує електрон з двома орієнтованими спінами, другий – описує позитрон з двома орієнтованими спінами. Для врахування

$$\varepsilon \rightarrow \varepsilon - e\phi(r); \bar{p} \rightarrow \bar{P} - \frac{e}{c} \bar{A}$$

зовнішніх полів, треба замінити

тоді $\Rightarrow \{\varepsilon - e\phi(r)\} \psi = [c \hat{\alpha} (\bar{P} - \frac{e}{c} \bar{A}) + \beta m c^2] \psi$ Запишемо вираз для

потенціалу $V(r) = e\phi(r)$

тоді $(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - V(r)) \left| \phi \right|_X = [c \bar{\alpha} (\bar{p} - \frac{e}{c} \bar{A}) + \beta m c^2] \left| \phi \right|_X$ не стаціонарне рівняння Дірака.

72 Рівняння Дірака

Рівняння Клейна-Гордона-Фока не описує явища, пов'язані зі спіном. Правильне рівняння повинно бути: а) лоренц-інваріантне б) лінійне в) 1-го порядку по просторових змінних (а значить і по часовим - з умови 1). Ми маємо

$$\varepsilon = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$$

- Цю формулу потрібно лінеаризувати і в той же час першого порядку по координаті. Введемо

імпульс $p = \left\{ mc, \vec{p} \right\}$ - не 4-імпульс. Тоді $\varepsilon = \sqrt{\sum_{\mu=0}^3 c^2 p_{\mu}^2}$.

Чи можна зробити перетворення за допомогою певного

матеріального об'єкту так, щоб $\sqrt{\sum_{\mu} c^2 p_{\mu}^2} = \sum_{\mu=0}^3 \alpha_{\mu} c p_{\mu}$;

Розглянемо $\varepsilon^2 = \sum_{\mu} \sum_{\mu'} c^2 p_{\mu} p_{\mu'} \left(\frac{\alpha_{\mu} \alpha_{\mu'} + \alpha_{\mu'} \alpha_{\mu}}{2} \right) \Rightarrow$ з іншого

боку, $\varepsilon^2 = \sum_{\mu=0}^3 c^2 p_{\mu}^2$. Отже, має бути $\alpha_{\mu} \alpha_{\mu'} + \alpha_{\mu'} \alpha_{\mu} = 2\delta_{\mu\mu'}$

$\alpha_{\mu}^2 = 1;$ Шукаємо $\hat{\alpha}_{\mu}$ у вигляді матриці 4×4

$$\alpha_1 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} = \sigma_x \quad \alpha_2 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} = \sigma_y$$

$$\alpha_3 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{vmatrix} = \sigma_z \quad \alpha_0 = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{vmatrix} = \beta$$

. Скорочено можна

записати
$$\vec{\alpha} = \left\{ \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3 \right\} = \begin{vmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{vmatrix}; \quad \beta = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix};$$

$$\varepsilon = c\vec{\alpha}\vec{p} + \beta mc^2; \quad \hat{\varepsilon} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t};$$

$$p = -i\hbar\nabla \Rightarrow \varepsilon\psi = \left(c\vec{\alpha}\vec{p} + \beta mc^2 \right) \psi \Rightarrow \boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left(-i\hbar c\vec{\alpha}\nabla + \beta mc^2 \right) \psi}$$

Нестационарне рівняння Дірака за відсутності поля. Розв'язок

потрібно шукати у вигляді
$$\psi = \begin{vmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{vmatrix};$$
 - чотири компоненти

хв.функції – спінори. Розіб'ємо ψ на блоки
$$\varphi = \begin{vmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{vmatrix}; \quad \chi = \begin{vmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{vmatrix};$$

- біспінори. Підставимо
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{vmatrix} \varphi \\ \chi \end{vmatrix} = c\vec{p} \begin{vmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \varphi \\ \chi \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} \cdot mc^2 \cdot \begin{vmatrix} \varphi \\ \chi \end{vmatrix}$$

або
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{vmatrix} \varphi \\ \chi \end{vmatrix} = c\vec{p}\vec{\sigma} \begin{vmatrix} \chi \\ \varphi \end{vmatrix} + mc^2 \begin{vmatrix} \varphi \\ -\chi \end{vmatrix} \Rightarrow \begin{cases} i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = c\vec{\sigma}\vec{p}\chi + mc^2 \varphi \\ i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = c\vec{\sigma}\vec{p}\varphi - mc^2 \chi \end{cases} \quad (**)$$

всього 4 рівняння (лінійна, першого порядку), у кожному з яких є всі 4 функції. Введемо густину ймовірності

$$\rho = \sum_{\mu=0}^3 |\psi_{\mu}|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + |\psi_3|^2 + |\psi_4|^2 \geq 0;$$

$$\begin{cases} (\varepsilon - mc^2) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = c\vec{\sigma}\vec{p} \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}; \\ (\varepsilon - mc^2) \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = c\vec{\sigma}\vec{p} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}; \end{cases} \text{ Для того, щоб система мала}$$

нетривіальний розв'язок, потрібно

$$\det = 0 \Rightarrow \left[\varepsilon^2 - \left(p^2 c^2 + m^2 c^4 \right) \right]^2 = 0 \Rightarrow \varepsilon = \pm \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$$

Енергія частинки, що описується рівнянням Дірака, може бути як додатною, так і від'ємною. Перший біспінор φ описує електрон з двома орієнтаціями спіна, другий - χ - описує позитрон з двома проекціями спіна. Для того, щоб врахувати

вплив зовнішніх полів, треба замінити $\varepsilon \rightarrow \varepsilon - e\varphi(r);$

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}; \quad \text{Тоді} \quad [\varepsilon - e\varphi(r)]\psi = \left[c\vec{\alpha} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) + \beta mc^2 \right] \psi;$$

$$e\varphi(r) \equiv \hat{V}(r); \quad \text{Отже,} \quad \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - V(r) \right) \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \left[c\vec{\alpha} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) + \beta mc^2 \right] \bullet \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix};$$

нестационарне рівняння Дірака. Розглянемо нерелятивістське наближення (малі енергії, рівняння (**)).

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = \varepsilon; \quad \begin{cases} \left(\varepsilon - V(r) - mc^2 \right) \varphi = c\vec{\sigma} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \chi \\ \left(\varepsilon - V(r) + mc^2 \right) \chi = c\vec{\sigma} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \varphi \end{cases}$$

а) нерелятивістський випадок – автоматично виникає спін

$\varepsilon = mc^2 + E$ - класична повна енергія. $|E| \ll mc^2; V(r) \ll mc^2;$

$$\begin{cases} (E - V(r))\varphi = \frac{mv^2}{2}\varphi = c\vec{\sigma}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\chi; \\ 2mc^2\chi = c\vec{\sigma}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\varphi; \end{cases} \Rightarrow (***) \quad \frac{mv^2}{4mc^2}\frac{\varphi}{\chi} = \frac{\chi}{\varphi};$$

$\varphi^2 = \frac{4c^2}{v^2}\chi^2; \quad v \ll c \Rightarrow |\varphi| \gg |\chi| \quad \varphi$ - стан електрона.

$$\chi = \frac{c\vec{\sigma}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)}{2mc^2}\varphi \quad . \text{З другого рівняння (***)}$$

$$(E - V(r))\varphi = \frac{c^2\vec{\sigma}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\vec{\sigma}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\varphi}{2mc^2} \quad . \text{Розглянемо окремо}$$

$$\vec{\sigma}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\vec{\sigma}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right) \quad . \text{Можна довести, що}$$

$$(\vec{\sigma}\vec{A})(\vec{\sigma}\vec{B}) = \vec{A}\vec{B} + i\vec{\sigma}[\vec{A}\vec{B}] \quad . \text{У нашому випадку} \quad \vec{A} = \vec{B} = \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \Rightarrow$$

$$\left(\vec{\sigma}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\right)^2 \varphi =$$

$$\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 \varphi + i\vec{\sigma}\left[\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right) \times \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\right] \varphi =$$

$$\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 \varphi + i\vec{\sigma}\left[\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right) \times \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\right] \varphi =$$

$$\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 \varphi + i\vec{\sigma}\left\{i\hbar\left[\nabla \times \vec{A}\right]\frac{e}{c}\varphi + i\hbar\frac{e}{c}\left[\vec{A} \times \nabla\right]\varphi\right\} =$$

$$\left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}\right)^2 \varphi + i\vec{\sigma} \left\{ \hbar \frac{e}{c} \right\} \left\{ \left[\nabla \times \vec{A} \right] \varphi + \left[\nabla \varphi \times \vec{A} \right] + \left[\vec{A} \times \nabla \varphi \right] \right\} =$$

$$\left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}\right)^2 \varphi - \frac{e\hbar\vec{\sigma}}{c} \left[\nabla \times \vec{A} \right] \varphi = \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}\right)^2 \varphi - \frac{e\hbar}{c} \vec{\sigma} \vec{H} \varphi; \quad . \text{Тому,}$$

$$\left(\vec{\sigma} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \right)^2 = \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - \frac{e\hbar\vec{\sigma}}{c} \vec{H} \quad . \text{Отже } (E - V(r))\varphi =$$

$$\frac{1}{2mc} \left[\left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \varphi \right] - \frac{e\hbar}{2mc} \vec{H} \vec{\sigma} \varphi;$$

тоді

$$\left(\frac{\left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2}{2\mu} + V(r) - \frac{e\hbar\vec{\sigma} \vec{H}}{2mc} \right) \varphi = \varepsilon \varphi$$

рівняння Паулі. $\vec{M}_S = \frac{e\hbar\vec{\sigma}}{2\mu c}$ - спіновий магнітний момент – автоматично з'являється у нерелятивістському наближенні.

Б) релятивістський випадок - $\varepsilon \gg mc^2$

$$\chi = \frac{c\vec{\sigma} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \varphi}{\varepsilon - V(r) + mc^2} \Rightarrow \left(\varepsilon - V(r) - mc^2 \right) \varphi = \frac{c^2 \left(\vec{\sigma} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \right)^2}{\varepsilon - V(r) + mc^2} \Rightarrow$$

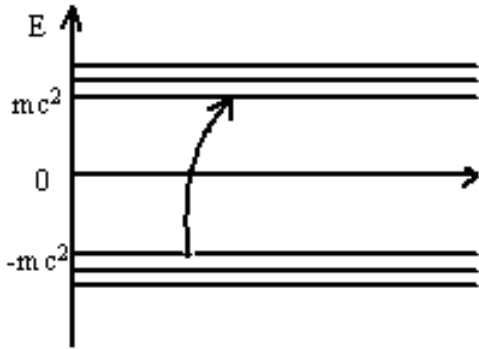
$$\left((\varepsilon - V(r))^2 - (mc^2)^2 \right) \varphi = c^2 \left\{ \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - \frac{e\hbar}{c} \vec{\sigma} \vec{H} \right\} \varphi \Rightarrow$$

$$\left(\varepsilon^2 - 2\varepsilon V(r) + V(r)^2 - m^2 c^4 \right) \varphi = c^2 \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \varphi - e\hbar \vec{\sigma} \vec{H} \varphi \quad . \text{Поділимо}$$

на $2mc^2$. Маємо $\frac{\left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2}{2m} \varphi + V(r) \frac{\varepsilon \varphi}{mc^2} - \frac{e\hbar \vec{\sigma} \vec{H}}{2mc} \varphi = \frac{\left(\varepsilon^2 + V^2 - m^2 c^4 \right)}{2mc^2} \varphi;$

$$\frac{\varepsilon}{mc^2} = \gamma; \quad \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \varphi + V(r)\varphi - \frac{e\hbar\vec{\sigma}\vec{H}}{2mc\gamma} \varphi = \frac{\varepsilon}{2} \varphi;$$

Отже, ми знаходимось у тій самій системі $V(r)$, але частинка вже має релятивіську масу γm .



При збільшенні ε зростає γ , тому власний магнітний момент частинки в лабораторній системі координат зменшується і може зникнути. При цьому частинка значно слабше взаємодіє з магнітним полем. Тепер щодо пояснення додатньої і від'ємної

енергії. Якщо вакууму надати енергію, більшу за $2mc^2$, то електрон з енергією $-mc^2$ перейде на рівень з енергією mc^2 , а на його місці виникне дірка – маємо народження електронно-позитронної пари.

73 Принципи лінеаризації гамільтоніану.

Користуючись порадами Максима Попова, можна стверджувати, що лінеаризація Гамільтоніана зводиться до переходу від релятивістського виразу гамільтоніану (зовнішні поля не враховуємо):

$$H = c\sqrt{p^2 + m^2 c^2}$$

до квазікласичного, шляхом розкладу релятивістського в ряд Тейлора за степенями імпульсу в околі нуля:

$$H|_{p=0} \approx mc^2 + p^2 / (2m).$$

Тоді, оператор Гамільтона без урахування енергії спокою запишеться у відомому вигляді, де він вже є лінійним (тобто оператор суми дає суму операторів):

$$\hat{H} = -\hbar^2 \Delta / (2m).$$

Що до глобалізації проведених дій, то я не знаю, що таке лінеаризація Гамільтоніану Теорія позитрона.

Позитрон є античастинкою електрона. Існування античастинок (частинок із протилежним зарядом) виникає саме у релятивістській теорії, адже врахування членів малих порядків (залежність маси від швидкості) призводить до виникнення частинок як і з додатньою, так і з від'ємною енергією. Неважко переконатись, що рівняння Клейна-Гордона (аналог рівняння Шредингера для нерелятивістського випадку) при відсутності зовнішніх полів, задовольняють хвильові функції із від'ємними та додатними енергіями:

$$\left(\varphi = A e^{i(\mathbf{p}\mathbf{r} - \varepsilon t) / \hbar}, \varepsilon = \pm (E_p = c\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2 c^2}) \right): \frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = [\hbar^2 \nabla^2 - m^2 c^2] \varphi.$$

Із цього випливають співвідношення для хвильових функцій частинок із різними зарядами.

Це основне для розуміння позитрона. Ще є дохуя математики, яку я нажаль не розумію, тому і писати не буду. Всю цю бурду можна знайти в Давидові на початку розділу "Квазірелятивістська квантова теорія".

Рівняння Паулі як нерелятивістське наближення рівняння Дірака. Релятивістська природа спіну електрона.

§ 67. Рівняння Паулі

Нас цікавитиме нерелятивістський перехід у рівнянні Дірака для частинки із зарядом e в електромагнітному полі з потенціалами V та \mathbf{A} :

$$\hat{H}_D \psi = E \psi,$$

$$\hat{H}_D = \left(\hat{\alpha}, \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) c + eV + \hat{\beta} m c^2.$$

Здійснимо в цьому рівнянні формальний розклад за степенями $1/c$. Запишемо його у вигляді системи двох матричних рівнянь

$$\left\{ \left(\hat{\alpha}, \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) c + eV + \hat{\beta} m c^2 \right\} \psi = E \psi.$$

$$\left\{ \begin{pmatrix} 0 & \left(\hat{\sigma}, \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) c \\ \left(\hat{\sigma}, \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) c & 0 \end{pmatrix} + eV \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} m c^2 \right\} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$$

або в явному вигляді

$$\left(\hat{\sigma}, \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) c\chi + eV\varphi + mc^2\varphi = E\varphi,$$

$$\left(\hat{\sigma}, \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) c\varphi + eV\chi - mc^2\chi = E\chi.$$

Будемо розглядати рух власне електрона, коли $E > 0$ і головною є функція φ . Ми виключаємо позитронні стани підстановкою в перше рівняння системи функції

$$\chi = \frac{1}{E + mc^2 - eV} c \left(\hat{\sigma}, \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) \varphi,$$

визначеної з другого рівняння. Тепер для функції φ з першого рівняння маємо:

$$\left\{ c \left(\hat{\sigma}, \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) \frac{1}{E + mc^2 - eV} c \left(\hat{\sigma}, \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) + eV \right\} \varphi = (E - mc^2)\varphi.$$

Відраховуючи енергію від енергії спокою $E = mc^2 + E'$, запишемо це рівняння в такому вигляді:

$$\left\{ \frac{1}{2m} \left(\hat{\sigma}, \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) \frac{1}{1 + (E' - eV)/2mc^2} \left(\hat{\sigma}, \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) + eV \right\} \varphi = E'\varphi.$$

Тепер ми маємо змогу перейти в ньому до нерелятивістської границі, коли

$$\frac{E' - eV}{2mc^2} \ll 1.$$

Квазірелятивістське наближення з точністю до $1/c$ отримаємо, якщо знехтуємо цим членом у знаменнику першого доданка в рівнянні:

$$\left[\frac{\left(\hat{\sigma}, \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2}{2m} + eV \right] \varphi = E'\varphi.$$

Розпишемо тепер квадрат оператора в ньому. Розглянемо більш загальний випадок, коли у вираз $(\hat{\sigma}\mathbf{a})(\hat{\sigma}\mathbf{b})$ входять довільні оператори \mathbf{a} та \mathbf{b} . Маємо:

$$\begin{aligned}(\hat{\sigma}\mathbf{a})(\hat{\sigma}\mathbf{b}) &= (\hat{\sigma}_x a_x + \hat{\sigma}_y a_y + \hat{\sigma}_z a_z)(\hat{\sigma}_x b_x + \hat{\sigma}_y b_y + \hat{\sigma}_z b_z) \\&= \hat{\sigma}_x^2 a_x b_x + \hat{\sigma}_y^2 a_y b_y + \hat{\sigma}_z^2 a_z b_z + \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y a_x b_y + \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x a_y b_x + \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z a_x b_z \\&\quad + \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x a_z b_x + \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z a_y b_z + \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y a_z b_y = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z \\&\quad + i\hat{\sigma}_z(a_x b_y - a_y b_x) + i\hat{\sigma}_y(a_z b_x - a_x b_z) + i\hat{\sigma}_x(a_y b_z - a_z b_y) \\&= (\mathbf{ab}) + i(\hat{\sigma}[\mathbf{ab}]).\end{aligned}$$

У нашому випадку

$$\mathbf{a} = \mathbf{b} = \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}$$

і, таким чином,

$$\left(\hat{\sigma}, \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 = \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + i\left(\hat{\sigma}\left[\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}, \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right]\right).$$

Тепер

$$\begin{aligned}\left[\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}, \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right] &= [\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{p}}] - \frac{e}{c}(-i\hbar)[\nabla\mathbf{A}] \\&\quad + \frac{e}{c}[\mathbf{A}\hat{\mathbf{p}}] - \frac{e}{c}[\mathbf{A}\hat{\mathbf{p}}] + \frac{e^2}{c^2}[\mathbf{A}\mathbf{A}] = \frac{ie\hbar}{c}\text{rot } \mathbf{A}.\end{aligned}$$

Перший і останній доданки дорівнюють нулеві, а в третьому доданку маємо знак “+” тому, що перенесення оператора $\hat{\mathbf{p}}$ направо міняє місцями \mathbf{A} та $\hat{\mathbf{p}}$ і векторний добуток при цьому змінює знак. Отже,

$$\left(\hat{\sigma}, \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 = \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 - \frac{e\hbar}{c}(\hat{\sigma}, \mathcal{H}),$$

де $\mathcal{H} = \text{rot } \mathbf{A}$ — напруженість магнітного поля. Таким чином, ми отримуємо рівняння

$$\left\{ \frac{\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2}{2m} - \frac{e\hbar}{2mc}(\hat{\sigma}\mathcal{H}) + eV \right\} \varphi = E'\varphi.$$

Це і є рівняння Паулі. Другий доданок у ньому

$$\Delta_1 \hat{H} = -\frac{e\hbar}{2mc}(\hat{\sigma}\mathcal{H})$$

має прозорий фізичний зміст. Перепишемо його так:

$$\Delta_1 \hat{H} = -(\hat{\mu}\mathcal{H}),$$

де

$$\hat{\mu} = \frac{e\hbar}{2mc}\hat{\sigma}$$

має зміст оператора власного магнітного моменту частинки. Отже, цей доданок у рівнянні є оператором енергії взаємодії власного магнітного моменту частинки із зовнішнім магнітним полем. Запишемо оператор $\hat{\mu}$ через оператор спіну $\hat{s} = \hbar\hat{\sigma}/2$ (гіромагнітне співвідношення):

$$\hat{\mu} = g\mu_B\hat{s},$$

де $\mu_B = e\hbar/2mc$ — магнетон Бора, а $g = 2$ — так званий g -фактор. Цей g -фактор визначає відношення магнітного моменту до механічного і у випадку орбітального руху електрона дорівнює одиниці. Як бачимо, з теорії Дірака випливає не лише наявність власного механічного моменту частинки, а й власного магнітного моменту. Якщо під m розуміти масу електрона, то отримується добре узгодження між обчисленим й експериментально вимірним значеннями магнітного моменту. Отже, рівняння Дірака з великою точністю описує поведінку електронів. Застосування рівняння Дірака до таких частинок, як протон або нейтрон, не є таким успішним, хоча деякі висновки, наприклад, про існування античастинок, стосовні і для них. Однак кількісно магнітні моменти цих частинок відрізняються від того, що дає теорія. Для протона g -фактор дорівнює не 2, а 2.793, якщо магнітний момент вимірювати в ядерних магнетонах⁴.

Релятивістська природа спіну електрона.

Рівняння Дірака в Гамільтоновому представленні має вигляд:

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = H_D \varphi; H_D = c\mathbf{a}\mathbf{p} + mc^2\mathbf{b}, a_k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix}, b_k = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; 0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

(1)

Для стаціонарних станів залежність хвильової функції від часу виражається формулою:

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}) e^{-i\frac{\varepsilon t}{\hbar}} \quad (2). \quad (2) \wedge (1) \Rightarrow \varepsilon \varphi(\mathbf{r}) = H_D \varphi(\mathbf{r}) \quad (3).$$

Покладемо: $\psi = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix}; \chi = \begin{pmatrix} \varphi_3 \\ \varphi_4 \end{pmatrix}; \varphi = \begin{pmatrix} \psi \\ \chi \end{pmatrix}.$ (4). Тоді, підставляючи (4)

до (3) отримаємо систему:
$$\begin{cases} (mc^2 - \varepsilon)\psi + c\bar{\sigma}\mathbf{p}\chi = 0, \\ c\bar{\sigma}\mathbf{p}\psi - (mc^2 + \varepsilon)\chi = 0. \end{cases} \quad (5)$$

Зробимо перехід від вільного руху, до руху в

електромагнітному полі:
$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}, \quad \varepsilon \rightarrow \varepsilon - eA_0. \quad (6)$$

Тоді із урахуванням слабкого поля в нерелятивістському

наближенні (тобто: $\varepsilon = E + mc^2, |E - eA_0| \ll mc^2$) із (5) матимемо:

$$\begin{cases} E\psi = c\bar{\sigma}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\chi + eA_0\psi, \quad (7) \\ \chi \approx \frac{1}{2mc}\bar{\sigma}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi. \quad (8) \end{cases}; \quad (7) \vee (5) \Rightarrow E\psi = \left\{ \frac{\left[\mathbf{r}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\right]^2}{2m} + eA_0 \right\} \psi. \quad (9)$$

Використаємо векторне співвідношення, притаманне

матрицям Паулі: $(\bar{\sigma}\mathbf{A})(\bar{\sigma}\mathbf{B}) = \mathbf{A}\mathbf{B} + i\bar{\sigma}[\mathbf{A}, \mathbf{B}]$ (10). Та отримаємо із (9) рівняння Паулі:

$$E\psi = \left\{ \frac{(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}/c)^2}{2m} + eA_0 - \frac{e\hbar}{2mc} (\bar{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{H}) \right\} \psi.$$

Порівнюючи це рівняння із рівнянням Шредингера, яке описує рух частинки в електромагнітному полі без урахування спіна, бачимо, що рівняння Паулі включає в собі доданок

$$-\frac{e\hbar}{2mc} (\bar{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{H}) \equiv -(\hat{\boldsymbol{\mu}}, \mathbf{H}) = -\mu_0 (\bar{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{H}).$$

Останнє можна інтерпретувати, як спін електрона.

76 ЧИСТІ ТА ЗМІШАНІ СТАНИ КВАНТОВОЇ СИСТЕМИ.

Будемо використовувати для опису станів квантової системи тільки функції, які залежать від координат (координатне представлення). В ряді випадків стан квантової системи може бути таким, що не мають певного значення всі або деяка частина фізичних величин, необхідних для визначення стану. Наприклад, стан вільного руху частинки, який описується хвильовою функцією у вигляді хвильового пакету. В цьому

стані $p_x = p_y = 0$, але p_z не має визначеного значення. В загальному випадку хвильові функції таких станів можуть бути представлені у вигляді суперпозиції власних функцій

деяких операторів
$$\psi = \sum_n a_n \psi_n + \int a_F \psi_F dF \quad (1).$$
 Якщо стан

системи визначається тільки трьома ступенями вільності, то хвильова функція буде залежати тільки від радіус-вектора \vec{r} . В цьому випадку хвильова функція може бути визначена через зміну густини імовірності в кожній точці простору з точністю до фазового множника, модуль якого рівний

одиниці. Дійсно, так-як $\rho(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2$, то $\psi(\vec{r}) = e^{i\alpha(\vec{r})} \sqrt{\rho(\vec{r})}$, де

$\alpha(\vec{r})$ - деяка дійсна функція \vec{r} . Стан квантової системи, який описується хвильовою функцією, називається чистим станом. Вони відповідають максимально повним відомостям про квантову систему. В квантовій системі можливі такі стани, яким неможливо співставити ніякої хвильової функції.

Прикладом таких станів можуть бути стани, які задаються

набором чисел $|a_n|^2$ і $|a_F|^2$, тобто ймовірностями станів з певними значеннями відповідних фізичних величин

F. В цьому випадку неможливо побудувати функції ψ по

типу (1), так як знання квадратів модулів коефіцієнтів a_n і A_F не дає фазових співвідношень між різними власними функціями ψ_n , які існують в означенні функції (1). Стани, яким неможливо співставити хвильову функцію, називають змішаними станами.

МАТРИЦЯ ГУСТИНИ.

Змішаний стан можна розглядати як некогерентну суміш чистих станів $\psi^{(i)}$ з статистичною вагою.

$W^{(i)}$; $\sum W^{(i)} = 1$. Словами “ некогерентна суміш ” при цьому виражає те, що при підрахунку середнього значення $\langle \bar{L} \rangle$ будь-якої фізичної величини L в змішаному стані необхідно визначити значення цієї величини в чистих станах $\psi^{(i)}$, тобто

підрахувати $\langle L^{(i)} \rangle = \int \psi^{*(i)} \hat{L} \psi^{(i)} d\tau$ (1) і отримані величини

усереднити, використовуючи статистичну вагу $W^{(i)}$, тоді

$\langle \bar{L} \rangle = \sum_i W^{(i)} \langle L^{(i)} \rangle$ (2). Розглянемо тепер чисті стани, які

визначаються скінченим числом власних функцій деякого оператора. В такому випадку довільний чистий стан

$\psi^{(i)}$ зображується лінійною суперпозицією $\psi^{(i)} = \sum_n a_n^{(i)} \psi_n$,

$\sum_n a_n^{*(i)} a_n^{(i)} = 1$. Підставляючи (3) в (1), маємо, що

квантомеханічне середнє значення в цьому стані величини L , якій відповідає оператор \hat{L} , буде знаходитись за

правилом $\langle L^{(i)} \rangle = \sum_{nn'} L_{nn'} a_n^{*(i)} a_{n'}^{(i)}$ (4), де $L_{nn'} = \int \psi_n^* \hat{L} \psi_{n'} d\tau$ -

матричні елементи, які визначаються власними функціями ψ_n і оператором \hat{L} . За допомогою (2) знаходимо

$\langle \bar{L} \rangle = \sum_i W(i) \sum_{nn'} L_{nn'} a_n^{*(i)} a_{n'}^{(i)}$ (6). Введемо матрицю з матричними

елементами $\rho_{n'n} = \sum_i W(i) a_n^{*(i)} a_{n'}^{(i)}$ (7). Враховуючи правило множення матриць, рівність (6) можна записати у вигляді

$$\langle \bar{L} \rangle = \sum_{nn'} L_{nn'} \rho_{n'n} = \sum_n (L\rho)_{nn}, \text{ або більш коротко}$$

$\langle \bar{L} \rangle = Sp(L\rho) = Sp(\rho L)$ (8), де знаком «Sp» (шпур) позначена сума діагональних елементів матриці, утвореної добутком матриці

L з матричними елементами (5), і матриці ρ з матричними елементами (7). Матриця ρ є квадратною і називається МАТРИЦЕЮ ГУСТИНИ (імовірність розподілу динамічної системи по власним енергіям з врахуванням впливу

термостату). Умова нормування $Sp(\rho) = 1$ - умова нормування матриці густини; з умови дійсності середніх значень випливає ермітовість матриці густини

$$\rho_{n'n}^* = \rho_{nn'}; \text{ Також можна довести властивість, що}$$

$$Sp(\hat{\rho}^2) \leq Sp(\hat{\rho})$$

77 РЕЛАКСАЦІЯ ДІАГОНАЛЬНИХ ТА НЕДІАГОНАЛЬНИХ ЕЛЕМЕНТІВ МАТРИЦІ ГУСТИНИ.

$$\frac{\partial \rho_{nn}}{\partial t} = \frac{1}{\hbar} \left[\hat{H}_{AB}, \hat{\rho} \right]_{nn} + \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{V}, \hat{\rho} \right]_{nn} \quad \hat{V} = 0$$

$$\rho_{nn} = \left(\sum_k \rho_{nk} W_{kn} - \sum_k \rho_{nn} W_{nk} \right) t = \sum_k (\rho_{nk} W_{kn} - \rho_{nn} W_{nk}) t$$

$$\frac{\partial \rho_{nn}}{\partial t} = \sum_k (\rho_{nk} W_{kn} - \rho_{nn} W_{nk})$$

В стані рівноваги

$$\frac{\partial \rho_{nn}^0}{\partial t} = 0 ; \quad \rho_{nk}^0 W_{kn} - \rho_{nn} W_{nk} = 0 ; \quad \rho_{nk}^0 = \frac{e^{-\frac{E_k}{kT}}}{Z} ;$$

$$\rho_{nn}^0 = \frac{e^{-\frac{E_n}{kT}}}{Z} \quad \frac{\rho_{nk}^0}{\rho_{nn}^0} = e^{\frac{-(E_k - E_n)}{kT}} = \frac{W_{nn}}{W_{nk}} ; \quad T_{nk} = \frac{\rho_{nk}^0}{W_{nk}} ;$$

$$T_{kn} = \frac{\rho_{nn}^0}{W_{kn}} ; \quad T_{nk} = T_{kn}$$

$$\frac{\partial \rho_{nn}}{\partial t} = \frac{1}{T_1} (\rho_{nn}^0 - \rho_{nn}) ; \quad \frac{\partial \rho_{nn}}{\partial t} + \frac{\rho_{nn}}{T_1} = \frac{\rho_{nn}^0}{T_1}$$

$$\rho_{nn}(t) = \rho_{nn}(0) e^{-\frac{t}{T_1}} + \rho_{nn}^0 (1 - e^{-\frac{t}{T_1}}) \quad T_1 - \text{граничний час життя}$$

(час релаксації)
$$\frac{\partial \rho_{nn}}{\partial t} = \sum_k \frac{1}{T_{nk}} (\rho_{kn} \rho_{nn}^0 - \rho_{nn} \rho_{nk}) + \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{V}, \rho \right]_{nn} ;$$

$$\frac{\partial \rho_{nn}}{\partial t} = \frac{1}{T_1} (\rho_{nn}^0 - \rho_{nn}) + \frac{1}{i\hbar} (\hat{V}, \hat{\rho})_{nn} \quad T_1 - \text{час поздовжньої}$$

релаксації

Релаксація недіагональних елементів

$$\frac{\partial \rho_{nm}}{\partial t} + iW_{nm}\rho_{nm} = \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{M}_{AB}, \rho \right]_{nm} ;$$

$$\rho_{nm} = \sum_{\alpha} w_{\alpha} b_{m}^{*}(\alpha) b_n(\alpha) \equiv \left\langle b_{m}^{*}(\alpha) b_n(\alpha) \right\rangle_{\alpha} \text{ Узагальнюючи міркування}$$

$$\frac{1}{i\hbar} \left[\hat{H}_{AB}, \rho \right]_{nm} = \frac{1}{\tau_{nm}} \rho_{nm} ; \quad T_{nm} = T_2 ; \quad T_2 - \text{час поперечної релаксації}$$

78 Самоузгоджена система для електромагнітного поля і речовини в наближенні матриці густини .

Розглянемо випадок, коли у системі діє поле. Обмежимося дипольним наближенням.

$$\hat{V} = -\vec{E}\vec{d} ; \left[\hat{V}, \rho \right]_{nn} = -\vec{E} \left(\vec{d}\hat{\rho} - \hat{\rho}\vec{d} \right)_{nn} = -\vec{E} \sum_k \left(\vec{d}_{nk} \rho_{kn} - \rho_{nk} \vec{d}_{kn} \right) ;$$

$$\left[\hat{V}, \rho \right]_{nm} = -\vec{E} \left(\vec{d}\hat{\rho} - \hat{\rho}\vec{d} \right)_{nm} = -\vec{E} \sum_k \left(\vec{d}_{nk} \rho_{km} - \rho_{nk} \vec{d}_{km} \right) \quad \text{Але}$$

ця система рівнянь не може правильно описати всі можливі випадки. Щоб вона стала універсальною, треба її доповнити зворотнім впливом системи на поле

$$\begin{cases} \nabla \times \vec{H} = \frac{4\pi}{c} \vec{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}; \\ \nabla \times \vec{E} = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{H}}{\partial t}; \\ \nabla \vec{D} = 0 \end{cases}$$

Домножимо кожне з рівнянь системи на ∇ . При цьому

пам'ятаємо, що $\vec{D} = \varepsilon \vec{E}$

$$\Delta \vec{E} - \frac{\varepsilon}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = \frac{4\pi}{c^2} \frac{\partial \vec{j}}{\partial t}; \quad \vec{j} = \frac{\partial \vec{P}}{\partial t}; \quad \vec{P} -$$

поляризація $\Delta \vec{E} - \frac{\varepsilon}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = \frac{4\pi}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{P}}{\partial t^2};$

$$\begin{aligned} \nabla \times \nabla \times \vec{E} &= \nabla(\nabla \vec{E}) - \Delta \vec{E} \\ &= -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \left(\nabla \times \vec{H} \right) = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{4\pi}{c} \vec{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \right); \end{aligned}$$

$$\vec{P} = \sum_i \vec{p}_i = N \langle \vec{p} \rangle \equiv N \langle \vec{d} \rangle$$

- поляризація системи

$$\Delta \vec{E} - \frac{\varepsilon}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} = \frac{4\pi N}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \sum_{n,m} \rho_{nm} \vec{d}_{nm}$$

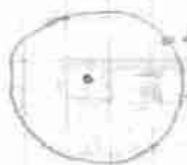
- третє рівняння системи.

79. Теорія фотоефекту.

Теорія фотоефекту

$$W_{sn} = \frac{4\pi^2 \hbar e^2}{\hbar^2 c \omega^2 \mu^2} \delta(E_s - E_n \pm \hbar \omega) \left| \int \psi_s^* e^{\pm i \vec{k} \cdot \vec{r}} (\vec{e}_k \cdot \hat{p}) \psi_n dV \right|^2$$

Початок стан ел-на в атомі зв'язаний, а кінцевий - вільний - особі фотоефекту



Покажемо, що найбільш фотоефект буде для сильно зв'язаних ел-нів (внутр-шкітних)

$$\psi_s = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a}} e^{-Z \frac{r}{a}}$$

$$a \rightarrow \frac{a}{Z}$$

кінцевий стан (вільна електронка)

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i \vec{p} \cdot \vec{r} / \hbar}$$

$$\int \psi_s^* e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} (\vec{e}_k \cdot \hat{p}) \psi_n dV = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a^3 V}} \vec{e}_k \cdot$$

$$\int e^{\frac{i \vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}} e^{-i \vec{k} \cdot \vec{r}} \hat{p} e^{-\frac{Z r}{a}} dV \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a^3 V}} \int e^{+i (\vec{k} - \frac{\vec{p}}{\hbar}) \cdot \vec{r}} \hat{p} e^{-\frac{Z r}{a}} dV =$$

$$= -i\hbar \sqrt{\frac{z^3}{\pi a^3 V}} \int e^{+i\vec{q}\vec{r}} \nabla e^{-z\frac{r}{a}} dV \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \left(\vec{k} - \frac{\vec{p}}{\hbar} \right) = \vec{q}$$

$$-i\hbar \sqrt{\frac{z^3}{\pi a^3 V}} \left(e^{+i\vec{q}\vec{r}} e^{-z\frac{r}{a}} \right) + i\vec{q} \int e^{+i\vec{q}\vec{r}} \cdot$$

$$\cdot e^{-z\frac{r}{a}} dV = -\hbar \vec{q} \sqrt{\frac{z^3}{\pi a^3 V}} 2\pi \int_0^\pi \int_0^{2\pi} e^{iqr \cos\theta} \cdot$$

$$\cdot e^{-z\frac{r}{a}} \sin\theta d\theta dr \Rightarrow$$

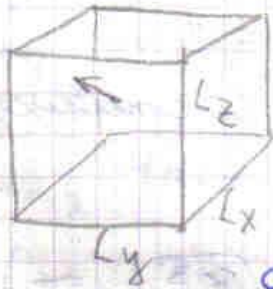
$$\Rightarrow -\hbar(\vec{q}\vec{e}_k) \sqrt{\frac{z^3}{\pi a^3 V}} 2\pi \cdot \frac{4a^3}{z^3(1+\frac{a^2q^2}{z^2})^2}$$

\vec{e}_k - вектор поляризации.

Условие резонанса:

$$W_{sn} = \frac{4\pi^2 (8\pi)^2 f + e^2}{\hbar c \omega^2 \mu^2} \delta(E_s - E_n + \hbar\omega) \cdot$$

$$\cdot \frac{a^6 |\vec{e}_k \vec{q}|}{z^6 (1 + \frac{a^2 q^2}{z^2})^4}$$



$$L_x = n_x \lambda_x$$

$$\lambda_x = \frac{L_x}{n_x}, \quad k_x = \frac{2\pi}{\lambda_x} = \frac{2\pi n_x}{L_x}$$

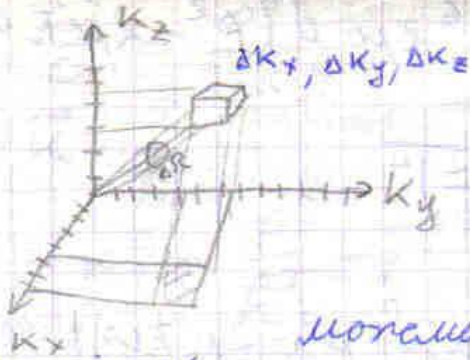
$$p_x = \hbar k_x = \frac{2\pi \hbar n_x}{L_x}$$

$$\delta k_x = \frac{2\pi L_x^{-1}}$$

$$\Delta n_x = \frac{\Delta k_x}{\delta k_x} = \frac{\Delta k_x L_x}{2\pi}$$

$$k_y = \frac{2\pi n_y}{L_y}$$

$$k_z = \frac{2\pi n_z}{L_z}$$



$$\Delta n = \Delta n_x \Delta n_y \Delta n_z =$$

$$= \frac{\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z L_x L_y L_z}{(2\pi)^3} =$$

$$= \frac{\Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z}{(2\pi \hbar)^3} \quad \text{— к-сть}$$

моментальных состояний e-на в объеме V.

$\Delta n = \frac{p^2 \Delta p \Delta \Omega}{(2\pi \hbar)^3} V$ — к-сть моментальных состояний в элементке, где p — импульс.

$g = 2s + 1$ — фактор вырождения.

$$dn = \frac{p^2 dp \Delta \Omega V}{4\pi^3 \hbar^3}$$

$$\frac{dn}{dp} \Big|_{\Delta \Omega} = \frac{p^2 V \Delta \Omega}{4\pi^3 \hbar^3} \quad \text{— число состояний}$$

расчетки

$$\frac{dn}{dp} \Big|_{\Delta \Omega = 4\pi} = \frac{p^2 V}{\pi^2 \hbar^3} \quad \text{— число моментальных}$$

состояний. Будем считать импульс p

$$E_n = \frac{p^2}{2\mu} = E_s + \hbar\omega$$

$$\delta(E_s - E_n \pm \hbar\omega) = \delta\left(E_s - \frac{p^2}{2\mu} \pm \hbar\omega\right) =$$

$$= 2\mu \delta(p^2 - 2\mu(E_s \pm \hbar\omega)) \Rightarrow$$

$$\hbar\omega \gg E_s$$

$$\Rightarrow 2\mu \delta(p^2 - 2\mu \hbar\omega)$$

$$W_{Sn} = \frac{128 \cdot \pi^4 \hbar^2 e^2}{\hbar c \omega^2 \mu^2 z^6} a^6 2\mu \delta(p^2 - 2\mu \hbar \omega) \cdot |\vec{e}_k \vec{p}| \cdot \frac{1}{\left(1 + \frac{a^2 q^2}{z^2}\right)^4} = A$$

$$W_{Sn} d n = d W_{Sn}$$

$$W_{Sn} = \int W_{Sn}(p) d n = A \int \frac{\delta(p^2 - 2\mu \hbar \omega)}{\left(1 + \frac{a^2 q^2}{z^2}\right)^4} \cdot \frac{p^2 V}{\pi^2 \hbar^3} d p^2$$

$$\Rightarrow \frac{A \cdot V}{2\pi^2 \hbar^3} \int \frac{\delta(p^2 - 2\mu \hbar \omega) \sqrt{p^2}}{\left(1 + \frac{a^2 q^2}{z^2}\right)^4} d p^2 =$$

$$= \frac{A V}{2\pi^2 \hbar^3} \frac{\sqrt{2\mu \hbar \omega}}{\left(1 + \frac{a^2 q^2}{z^2}\right)^4} \Big|_{p = \sqrt{2\mu \hbar \omega}}$$

Блохицкий ев „Основы квантовой механики“

11.04



$$P_{Sn} = \frac{528 \hbar^2 e^2 a^3}{\hbar^4 c \omega^2 \mu^2 z^3} \int \frac{|\vec{e}_k \vec{p}|^2 \delta(p^2 - 2\mu(E_S + \hbar \omega)) \sqrt{p^2}}{\left(1 + \frac{a^2 q^2}{z^2}\right)^4} d(p^2) \Delta \Omega$$

$$d(p^2) \Delta \Omega = \frac{528 \hbar^2 e^2 a^3 \Delta \Omega}{\hbar^4 c \omega^2 \mu^2 z^3} \frac{|\vec{e}_k \vec{p}|^2 \sqrt{2\mu(E_S + \hbar \omega)}}{\left(1 + \frac{a^2 q^2}{z^2}\right)^4}$$

$$p = \sqrt{2\mu(E_S + \hbar \omega)}$$

Трунцковский

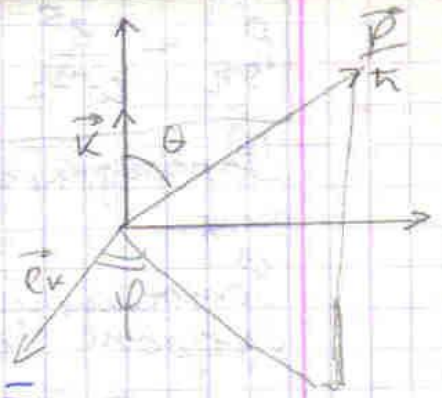
$$\hbar \omega \gg E_S$$

$$p = \sqrt{2\mu \hbar \omega}$$

$$\omega = \frac{p^2}{2\mu \hbar}$$

$$k = \frac{\omega}{c} = \frac{p^2}{2\mu\hbar^2 c}$$

$$\vec{q} = \vec{k} + \frac{\vec{q}}{\hbar}$$



$$q^2 = k^2 + \frac{p^2}{\hbar^2} - 2 \frac{k p}{c} \cos \theta =$$

$$= \frac{p^2}{\hbar^2} \left(1 + \frac{k^2 c^2}{p^2} - 2 \frac{k c}{p} \cos \theta \right) =$$

$$= \frac{p^2}{\hbar^2} \left(1 + \frac{p^4 c^2}{4\mu^2 c^4 \hbar^2 p^2} - \frac{2 p^2}{2\mu\hbar c p} \cos \theta \right) =$$

$$= \frac{p^2}{\hbar^2} \left(1 + \frac{\mu^2 v^2}{4\mu^2 c^2} - \frac{\mu v}{\mu c} \cos \theta \right) = \frac{p^2}{\hbar^2} \left(1 + \frac{v^2}{4c^2} - \frac{v}{c} \cos \theta \right)$$

$$P_{sn} = A \frac{\Delta \Omega}{\omega^2 z^2} \frac{p^2 \sin^2 \theta \cos^2 \varphi \sqrt{2\mu\hbar\omega}}{\left(1 + \left(\frac{a^2}{z^2} \cdot \frac{p^2}{\hbar^2} \right) \left(1 - \frac{v}{c} \cos \theta \right) \right)^4}$$

$$\frac{a^2 p^2}{z^2 \hbar^2} = \frac{a^2 \mu \cdot 2 \cdot \hbar \omega}{z^2 \hbar^2} = \frac{2\mu\hbar\omega\hbar^4}{z^2 \hbar^2 \mu^2 c^4} = \frac{\hbar\omega}{\left(\frac{z^2 \mu e^4}{2\hbar^3} \right)}$$

≈ 1 (такая фигура)

⇒ 1

$$P_{sn} = A (2\mu\hbar\omega)^{3/2} \sin^2 \theta \cos^2 \varphi \Delta \Omega \cdot$$

$$\frac{z^8 \mu^4 e^8 \cdot 1}{\omega^2 z^3 \left(1 - \frac{v}{c} \cos \theta \right)^4 \cdot (\hbar\omega)^4 (2\hbar^2)^4}$$

Зависит от расстояния без запятой, значит

$$P_{sn} = \frac{z^5 \Delta \Omega \sin^2 \theta \cos^2 \varphi}{\omega^{9/2} \left(1 - \frac{v}{c} \cos \theta \right)^4} \cdot A \frac{(2\mu\hbar)^{3/2} \mu^4 e^8}{\hbar^8 \cdot 2^8}$$

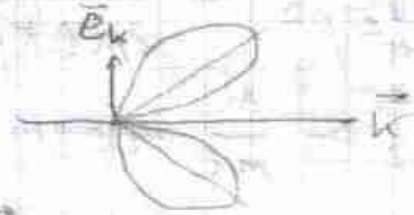
$$P_{\text{sn}} \sim \frac{z^5}{\omega^{3/2}} \frac{\sin^2\theta \cos^2\varphi \Delta l}{\left(1 - \frac{v}{c} \cos\theta\right)^2}$$

Фотосекция значнее при малых ω

Фотосекция при $\frac{v}{c} \ll 1$ величествен
взросле e_k вектора поляризации



$\frac{v}{c} < 1$:



$\frac{v}{c} \lesssim 1$



При малых ω - векторная диаграмма становится более параллельной.

1. Передумови виникнення квантової механіки. Теорії Планка та Ейнштейна. Постулати Бора. Хвиля де Бройля.....	(1-2)
2. Статистичний характер явищ мікросвіту. Імовірнісна інтерпретація хвильової функції.....	3-4)
3. Рівняння Шредінгера як основа квантового опису мікросвіту.....	(5-7)
Загальні принципи відшукання його розв'язків, які мають фізичний зміст.....	(6)
Вільний рух частинок.....	(7)
4. Одномірний рух та його властивості.....	(8-9)
5. Приклади одномірного руху - рух в однорідному полі, випадок кусково-сталого потенціалу, потенціальні ями нескінченно великої, довільної та малої глибини.....	(10-12)
Потенціальна яма нескінченної глибини.....	(10-11)
Рух в однорідному полі.....	(12)
Рух в кусково-неперервному потенціалі.....	(12)
6. Тунельний ефект через прямокутний та дельта-подібний бар'єри, яма Пешля-Теллера.....	(13-16)
Тунельний ефект через прямокутний та дельта-подібний бар'єри.....	(13-15)
Яма Пешля-Теллера.....	(15-16)
7. Гармонічний осцилятор (одно та тривимірний).....	(17-18)
8. Постулати квантової механіки.....	(19-20)
Поняття та властивості стану.....	(19)
Зображення фізичних величин лінійними самоспряженими операторами.....	(19)
Власні функції та власні значення оператора. Функції від операторів.....	(19-20)
9. Оператори імпульсу, енергії, моменту кількості руху.....	(21)
Поняття та властивості стану.....	(21)
Комутативність операторів і сумісність фізичних величин.....	(21)
10. Загальне співвідношення невизначеності, його зміст, інтерпретація та наслідки. Випадки координати, імпульсу, часу та енергії.....	(22-24)
Рух частинок в періодичному потенціалі. Гребінка Дірака. Зонна структура спектру дозволених рівнів енергії.....	(23-24)
11. Зміна стану частинок у часі. Нестационарне рівняння Шредінгера.....	(25-26)
Рівняння неперервності для густини струму ймовірності.....	(26)
12. Стаціонарні розв'язки.....	(27)
13. Оператор похідної фізичної величини. Закон зміни операторів з часом. (рівняння руху для операторів).....	(28-29)
14. Теорема Еренфеста. Квантові рівняння Ньютона.....	(30)
15. Інтеграл руху в квантовій механіці - випадок однорідних полів.....	(31-32)
Розглянемо випадок центрально-симетричних полів.....	(31-32)
Розглянемо випадок аксіально-симетричних полів.....	(32)
16. Рух частинки у центрально симетричному полі.....	(33-35)
Стаціонарні стани в сферичних координатах.....	(33-35)
17. Розщеплення хвильової ф-ції на радіальну та кутову частини.....	(36-37)
Загальний розв'язок для кутової частини хвильової ф-ції.....	(36-37)
18. Р-ня для радіальної частини хвильової ф-ції. Випадки дискретного та неперервного спектрів.....	(38-39)
19. Рух частинок в кулонівському потенціальному полі.....	(40-41)
20. Теорія атома водню та воднево подібних атомів. Випадки дискретного та неперервного спектрів.....	(42-49)
Дискретний спектр.....	(46-47)
Неперервний спектр.....	(48-49)
21. Випадки дискретного та неперервного спектрів. Відсутнє Квантові числа та їх фізичний зміст.....	(50)
22. Виродження енергетичних рівнів.....	(51-52)
23. Струм в атомах та магнітний орбитальний момент атома.....	(53-54)
Гіромагнітне відношення.....	(54)
24. Коливальний та обертальний рух в двоатомній молекулі.....	(55)
25. Хвильова функція s-ми в довільному представленні.....	(56-57)
26. Оператор фізичної величини в довільному представленні.....	(58-60)
27. Середнє значення фізичної величини в довільному представленні.....	(61)
28. Знаходження власних ф-цій довільного оператора в довільному матричному представленні.....	(62-63)
29. Рівняння Шредінгера у власній формі і у власному енергетичному представленні.....	(64)
30. Спін електрона.....	(65-66)
Теорія спіна електрона.....	(66)

31. Матриці Паулі.....	(67-69)	Рівняння Паулі	(68-69)
32. Атом в магнітном поле.			(70-72)
33. Движение в однородном магнитном поле.....			(73-74)
34. Стан електронів в атомах з урахуванням спіну.....			(75)
35. ПРИНЦИП НЕРОЗРІЗНЮВАННОСТІ ТОТОЖНИХ ЧАСТИНОК ТА ЙОГО НАСЛІДКИ.....			(76-77)
36. ФЕРМІОНИ ТА БОЗОНИ.....			(78)
37. ПРИНЦИП ПАУЛІ.....			(79-80)
38. ОБМІННА ВЗАЄМОДІЯ.....			(82-83)
39. Систематика та позначення енергетичних рівнів багатоелектронних атомів.....			(84-87)
40. СПІН-ОРБІТАЛЬНИЙ ЗВ'ЯЗОК ТА ЙОГО ТИПИ.....			(88-91)
41. ПЕРІОДИЧНА СИСТЕМА ЕЛЕМЕНТІВ МЕНДЕЛЄЄВА.....			(92-96)
42. Квазікласичне наближення (Метод ВКБ). Одномірний та багатомірний випадки. Граничні умови та критерії справедливості методу ВКБ. Правило квантування Бора-Зоммерфельда.....			(97-100)
43. ПРЯМИЙ ВАРІАЦІЙНИЙ МЕТОД РІТЦА РОЗВ'ЯЗКУ ЗАДАЧ.....			(101-105)
44. Теорія збурень як метод наближеного розв'язку задач квантової механіки.....			(106-108)
45. Стаціонарне збурення. Випадки відсутності та наявності виродження. Критерій застосування теорії збурень.....			(109-110)
46. Квадратичний ефекти Штарка.....			(111-115)
Лінійний ефект Штарка.....	(112-113)	Ангармонічний осцилятор.....	(114-115)
47. Нестационарне збурення.....			(116-117)
48. Точний розв'язок рівняння Шредінгера для дворівневої збуреної системи.....			(118)
49. Частота та прецесія Рабі.....			(119-120)
50. Ймовірність переходу під дією малого збурення. Випадок гармонійного збурення.(f -функція)....			(121)
51. Збудження атома та міжрівневі переходи в атомах під дією кулонівського поля важкого йона, що рухається. Випадки адіабатичної та імпульсної взаємодії.....			(122-124)
Метод псевдофотонів Вайцзеккера.....			(124)
52. Взаємодія атома з електромагнітним полем довільної довжини хвилі.....			(125-129)
53. Дипольне наближення при взаємодії електромагнітного випромінювання з атомними системами.....	130.131		
54. Правила відбору для дипольних переходів.....			(132-134)
55. Квадрупольне та мультипольне наближення в теорії випромінювання.....			(135-137)
56. Квантова теорія дисперсії.....			(138-139)
57. Атомные и молекулярные спектры. Эффект Месбауера			(140-142)
58. Квантування електромагнітного поля. Фотони. Енергія квантового електромагнітного поля.....			(143-144)
59. Просторова та частотна густина станів.....			(145)
60. Взаємодія квантованого ел.-маг. Поля з атомом.....			(146-149)
61. Взаємодія атома з однією резонансною модою поля (Це взяте просто з методички Висоцького тому не дивуйтесь позначення формул).....			(150-154)
62. Взаємодія атома з двома симетрично розташованими резонансними модами поля.....			(155-159)
Коефіцієнти Ейнштейна для спонтанного та вимушеного випромінювання.....			(157-159)
63. Взаємодія збудженого атома з квазінеперервним ансамблем мод електромагнітного поля.....			(160-169)
65. Явища релятивізму як мала поправка до нерелятивістських рівнянь КМ (квантової механіки).....			(170-171)
66. Явища релятивізму як мала поправка до нерелятивістських рівнянь в квантовій механіці.....			(172-173)
69. 4-Імпульс та 4-потенціал. Релятивістське рівняння Клейна-Гордона-Фока (КГФ).....			(174-175)
70. Рівняння Клейна-Гордона-Фока.....			(176-177)
71. Рівняння Дірака.....			(178-180)
72. Рівняння Дірака (більш докладно).....			(181-186)
Нерелятивістський випадок.....	(183-185)	Релятивістський випадок.....	(185-186)
73. Принципи лінеаризації гамільтоніану.....			(187-193)
Рівняння Паулі.....			(188-191)
Релятивістська природа спіну електрона.....			(192-193)
76. ЧИСТІ ТА ЗМІЩАНІ СТАНИ КВАНТОВОЇ СИСТЕМИ.....			(194-196)
Матриця густини.....			(195-196)
77. РЕЛАКСАЦІЯ ДІАГОНАЛЬНИХ ТА НЕДІАГОНАЛЬНИХ ЕЛЕМЕНТІВ МАТРИЦІ ГУСТИНИ.....	197.198		
78. Самоузгоджена система для електромагнітного поля і речовини в наближенні матриці густини.....	199-200)		
79. Теорія фотоефекту.....			(201-206)

