Квантовая механика.

Квант. мех.

2 сентября

Лекция 1

‖ Приближенные методы для стац. ур-я Шредингера.

Стац. ур-е Шр. $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$
(точно не решается в большинстве случ.)

Методы:

1) стац. теория возмущений
2) вариационные
3) квазиклассика (Вайкельса - Крамерса - Бриол.)

Стационарная теория возмущений

① $H = H_0 + H_I$ (НЕТ ВЫРОЖДЕНИЯ)
невозм. возмущение

Мы должны так или иначе решать задачу (точно или в приближении) $H_0|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle$, а H_I должно быть малой поправкой к H_0.

Пытаемся найти E_n и $|\psi_n\rangle$ в виде ряда теории возм.:

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots$$ (дальше не пишут)

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + |\psi_n^{(1)}\rangle + |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots$$

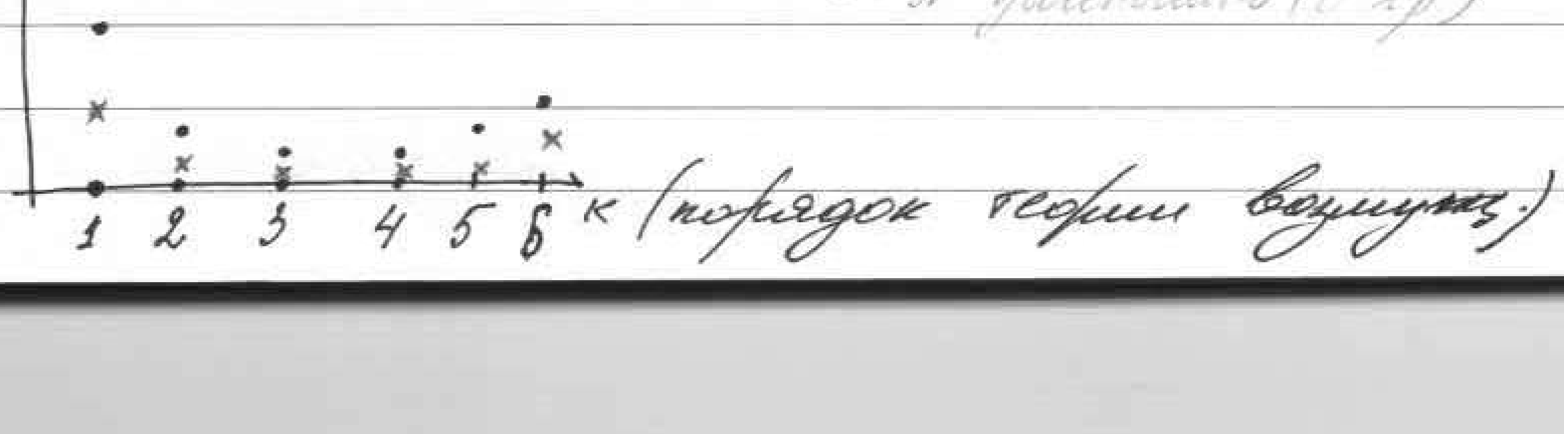
Сх-ть?

В физически инт. задачах ряды не сходятся, интересен больше вопрос применимости т. в.

Пример: гарм. осц. $\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2} \to H_0$

добавим возмущение $H_I = \alpha x^2 \Rightarrow$ задача реш. полностью.

Допустим $H_I = \alpha x^4$ тогда ряд расходится для сколь угодно малого α.



Бросать т.в. нужно на 1 шаг раньше того, когда след. поправка будет больше предыдущей.

Вариационным методом лучше (в некот. порядках), иногда хуже.

$\measuredangle\ f(x) = 1 + 10^{-2}x + \frac{10^{-4}}{1-x} = 1 + 10^{-2}x + 10^{-4}(1 + x + x^2 + x^3 + x^4 + \ldots)$

$\uparrow$ ряд Тейлора

При $x=2$: $f(2) = 1 + 2\cdot 10^{-2} - 10^{-4}$

$x^0: f^{(0)} = 1 + 10^{-4}$

$x^1: f^{(0)} + f^{(1)} = 1 + 10^{-2}\cdot 2 + 3\cdot 10^{-4}$ $\Rightarrow$ до 1-ого порядка

Построение ряда т.в.:

а) невырожденный уровень ($E_n^{(0)} \rightarrow \exists! |\psi_n^{(0)}\rangle$)

I порядок

$|\psi_n\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + |\psi_n^{(1)}\rangle$, $E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)}$

$H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$

$$H|\psi_n^{(0)}\rangle + H|\psi_n^{(1)}\rangle = \cancel{E_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle} + E_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle + \cancel{E_n^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle}.$$

$\parallel$

$H_0 + H_I$

$$\left[\cancel{H_0|\psi_n^{(0)}\rangle} + H_0|\psi_n^{(1)}\rangle + H_I|\psi_n^{(0)}\rangle + \cancel{H_I|\psi_n^{(1)}\rangle}\right]$$

$\Rightarrow H_I|\psi_n^{(0)}\rangle + H_0|\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle + E_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle$ (записаны члены с 1 пор. малости)

($H_0|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle \rightarrow \langle\psi_n^{(0)}|H_0 = \langle\psi_n^{(0)}|E_n^{(0)}$)

слева и справа гильбертовы вектора $\Rightarrow$ они равны $\Leftrightarrow$ равны разложения по произв. базису.

2 случая: 1. $|\psi_n^{(0)}\rangle$ (n-уровень, к которому мы считаем попр.)

2. $|\psi_m^{(0)}\rangle$, $m \neq n$. (m-все ост. уровни)

$E_n^{(1)}$ - поправка к n-ому ур-нию

$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_k c_k^{(1)}|\psi_k^{(0)}\rangle$ $\left(c_k^{(1)} = \langle\psi_k^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle\right)$

Условие применимости $\boxed{|c_n^{(1)}| \ll 1}$

необязательно: $|E_n^{(1)}| \ll |E_n^{(0)} - E_{n\pm1}^{(0)}|$

$|E_n^{(2)}| \ll |E_n^{(1)}|$

$\langle\psi_n^{(0)}|\times$

$$\langle\psi_n^{(0)}|H_I|\psi_n^{(0)}\rangle+\langle\psi_n^{(0)}|H_0|\psi_n^{(1)}\rangle=\langle\psi_n^{(0)}|E_n^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle+$$
$$+\langle\psi_n^{(0)}|E_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle$$

$$\langle\psi_n^{(0)}|H_I|\psi_n^{(0)}\rangle+\langle\psi_n^{(0)}|\cancel{E_n^{(0)}}|\psi_n^{(1)}\rangle=\langle\psi_n^{(0)}|\underset{E_n^{(1)}}{\cancel{E_n^{(1)}}}|\psi_n^{(0)}\rangle+\cancel{\langle\psi_n^{(0)}|E_n^{(0)}|\cdot|\psi_n^{(1)}\rangle}$$

$$\boxed{E_n^{(1)}=\langle\psi_n^{(0)}|H_I|\psi_n^{(0)}\rangle}$$

$\langle\psi_m^{(0)}|\times\ (m\neq n)$

$$\langle\psi_m^{(0)}|H_I|\psi_n^{(0)}\rangle+\underbrace{\langle\psi_m^{(0)}|H_0}_{E_m^{(0)}\langle\psi_m^{(0)}|}|\psi_n^{(1)}\rangle=\overset{0}{\cancel{\langle\psi_m^{(0)}|E_n^{(1)}}}|\psi_n^{(0)}\rangle+$$
$$+\langle\psi_m^{(0)}|E_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle$$

$$\langle\psi_m^{(0)}|H_I|\psi_n^{(0)}\rangle+E_m^{(0)}\underbrace{\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle}_{C_m^{(1)}}=E_n^{(0)}\underbrace{\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle}_{C_m^{(1)}}$$

$$\boxed{C_m^{(1)}=\frac{1}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\langle\psi_m^{(0)}|H_I|\psi_n^{(0)}\rangle}$$

вот возникла важность невырожденности.

$$|\psi_n^{(1)}\rangle=\underbrace{C_n^{(1)}}_{\ll 1}|\psi_n^{(0)}\rangle+\sum_{m\neq n}\underbrace{\frac{\langle\psi_m^{(0)}|H_I|\psi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}}_{\ll 1}|\psi_m^{(0)}\rangle$$

Условие применимости: $\boxed{|\langle\psi_m^{(0)}|H_I|\psi_n^{(0)}\rangle|\ll|E_n^{(0)}-E_m^{(0)}|}$

$\boxed{!}$ Если нас интересует конкр. n, то не надо требовать выполнения для $\forall m$, т.е. $\exists$ группа уровней, к которым применима т.в, и группа, к которой она не применима.

$C_n^{(1)}$?

$\exists$ усл. нормировки. $\measuredangle$ $|\psi_n\rangle=|\psi_n^{(0)}\rangle+|\psi_n^{(1)}\rangle$

$$1=\langle\psi_n|\psi_n\rangle=\underbrace{\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle}_{=1}+\underbrace{\langle\psi_n^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle}_{C_n^{(1)*}}+\underbrace{\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle}_{C_n^{(1)}}$$

$$\Rightarrow C_n^{(1)}+C_n^{(1)*}=0$$

$$\Rightarrow C_n^{(1)}=i\varphi,\ \text{где}\ \varphi\in Re,\ |\varphi|\ll 1.$$

$\Downarrow$

это фазовый произвол

т.е. $|\psi_n\rangle=|\psi_n^{(0)}\rangle+i\varphi|\psi_n^{(0)}\rangle+\sum_{m\neq n}|\psi_m^{(0)}\rangle\frac{\langle\psi_m^{(0)}|H_I|\psi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}$

$|\psi_n^{(0)}\rangle + i\varphi|\psi_n^{(0)}\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle \cdot e^{i\varphi}$.

Пользуясь фазовым произволом $\varphi \equiv 0$ (← соглашение о фазе)

другой способ: $\sum\limits_{m\neq n} \frac{|\psi_m^{(0)}\rangle\langle\psi_m^{(0)}|}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}} H_I|\psi_n^{(0)}\rangle$

II порядок

$$H_0|\psi_n^{(2)}\rangle + H_I|\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(0)}|\psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)}|\psi_n^{(0)}\rangle$$

Не знаем $|\psi_n^{(2)}\rangle$ и $E_n^{(2)}$.

$\langle\psi_n^{(0)}|\times$

$$\langle\psi_n^{(0)}|\cancel{H_0}|\psi_n^{(2)}\rangle + \langle\psi_n^{(0)}|H_I|\psi_n^{(1)}\rangle = \langle\psi_n^{(0)}|\cancel{E_n^{(0)}}|\psi_n^{(2)}\rangle +$$
$$+ \underbrace{\langle\psi_n^{(0)}|E_n^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle}_{E_n^{(1)}\cdot c_n^{(1)} = E_n^{(1)}\cdot i\varphi = 0} + \underbrace{\langle\psi_n^{(0)}|E_n^{(2)}|\psi_n^{(0)}\rangle}_{E_n^{(2)}}.$$

$$\boxed{E_n^{(2)} = \langle\psi_n^{(0)}|H_I|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m\neq n}\frac{\langle\psi_n^{(0)}|H_I|\psi_m^{(0)}\rangle\langle\psi_m^{(0)}|H_I|\psi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}}$$

Лекция 2

9 сентября

$$E_n^{(2)} = \sum_{m\neq n}\frac{|\langle\psi_m^{(0)}|H_I|\psi_n^{(0)}\rangle|^2}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}$$

$\langle\psi_m^{(0)}|\times$

$$H_0|\psi_n^{(2)}\rangle + H_I(|\psi_n^{(1)}\rangle) = E_n^{(0)}|\psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle + \cancel{E_n^{(2)}|\psi_n^{(0)}\rangle}\to 0$$

т.к. $\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle = 0$, $m\neq n$

$$\langle\psi_m^{(0)}|E_m^{(0)}|\psi_n^{(2)}\rangle + \langle\psi_m^{(0)}|H_I|\psi_n^{(1)}\rangle = \langle\psi_m^{(0)}|E_n^{(0)}|\psi_n^{(2)}\rangle + \langle\psi_m^{(0)}|E_n^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle$$

$$C_m^{(2)} = \langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(2)}\rangle = \frac{1}{E_m^{(0)}-E_n^{(0)}}\cdot\left[-\langle\psi_m^{(0)}|H_I|\psi_n^{(1)}\rangle + \langle\psi_m^{(0)}|E_n^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle\right]$$

$$\boxed{C_m^{(2)} = \frac{1}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\left[\langle\psi_m^{(0)}|H_I|\psi_n^{(1)}\rangle - \underbrace{\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle}_{C_m^{(1)}}E_n^{(1)}\right]}$$

$$C_m^{(2)} = \frac{1}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\cdot\left[C_n^{(1)}\langle\psi_m^{(0)}|H_I|\psi_n^{(0)}\rangle + \sum_{m\neq n}\frac{\langle\psi_m^{(0)}|H_I|\psi_m^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\cdot\right.$$
$$\left.\cdot\langle\psi_m^{(0)}|H_I|\psi_n^{(0)}\rangle - C_n^{(1)}\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle E_n^{(1)} - \sum_{m\neq n}E_n^{(1)}\frac{0}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\right] = \dots$$

$$C_m^{(2)} = \frac{1}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\Big[C_n^{(1)}\langle\psi_m^{(0)}|H_I|\psi_n^{(0)}\rangle + \sum_{m\neq n}\frac{1}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\cdot\langle\psi_m^{(0)}|H_I|\psi_m^{(0)}\rangle\cdot$$

$$\cdot\langle\psi_m^{(0)}|H_I|\psi_n^{(0)}\rangle - C_n^{(1)}\cdot\langle\psi_n^{(0)}|H_I|\psi_n^{(0)}\rangle\Big] \Rightarrow$$

$$C_m^{(2)} = \frac{1}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\, C_n^{(1)}\Big[\langle\psi_m^{0}|H_I|\psi_n^{(0)}\rangle - \langle\psi_n^{(0)}|H_I|\psi_n^{(0)}\rangle\Big] +$$

$$+\frac{1}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\sum_{m\neq n}\frac{1}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\langle\psi_m^{(0)}|H_I|\psi_m^{(0)}\rangle\cdot\langle\psi_m^{(0)}|H_I|\psi_n^{(0)}\rangle.$$

$$\tilde{G}(E_n^{(0)}) = \sum_{m\neq n}\frac{|\psi_m^{(0)}\rangle\langle\psi_m^{(0)}|}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}$$ — ф-я Грина

$$\Rightarrow E_n^{(2)} = \langle\psi_n^{(0)}|H_I\tilde{G}\cdot H_I|\psi_n^{(0)}\rangle.$$

~~$\Delta\; H_0 = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$ (в коорд. представлении)~~

② (ВЫРОЖДЕНИЕ)

Введем обозначения:

Кратность вырождения: $\underline{A}$: $H_0|\psi_{\textcircled{n}\boxed{a}}^{(0)}\rangle = E_{\textcircled{n}}^{(0)}|\psi_{n,a}^{(0)}\rangle$

$\longrightarrow 1, 2, \dots, A$

Нулевое приближение: $|\psi_n^{(0)}\rangle \equiv \sum_{a=1}^{A} C_a^{(0)}|\psi_{n,a}^{(0)}\rangle$

$$\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle = 1 = \sum_{a=1}^{A}|C_a^{(0)}|^2$$

Вспоминаем: $H_0|\psi_n^{(1)}\rangle + H_I|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle$

Теперь $\times\langle\psi_{n,b}^{(0)}|$ для всех $b = 1, 2, \dots, A$.

$$\cancel{\langle\psi_{nb}^{(0)}|\underset{E_n^{(0)}}{H_0}|\psi_n^{(1)}\rangle} + \langle\psi_{n,b}^{(0)}|H_I|\psi_n^{(0)}\rangle = \cancel{\langle\psi_{nb}^{(0)}|E_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle} +$$

$$+\langle\psi_{nb}^{(0)}|E_n^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle$$

$$\langle\psi_{n,b}^{(0)}|H_I|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(1)}\langle\psi_{nb}^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(1)}\cdot c_b^{(0)}$$

$$\boxed{\sum_{a=1}^{A}\langle\psi_{n,b}^{(0)}|H_I|\psi_{n,a}^{(0)}\rangle c_a^{(0)} = E_n^{(1)}\cdot C_b^{(0)}}$$ — секулярное ур-е.

$\uparrow$ матрица A×A $\nwarrow$ это фактически задача на СЗ и СФ.

$$\begin{array}{c} \boxed{\text{уровень}} \\ E_n^{(0)} \\ \hline A\text{ штук} \\ |\psi_{n1}^{(0)}\rangle, |\psi_{n2}^{(0)}\rangle, \ldots \\ \ldots, |\psi_{nA}^{(0)}\rangle \end{array} \; A \left\{ \begin{array}{l} \underline{E_n^{(0)}+\lambda_1} \; \sum\limits_{a=1}^{A} C_a^{(0)}|\psi_{n,a}^{(0)}\rangle, \; C_a^{(0)} \text{ соотв. } \lambda_1. \\ \underline{E_n^{(0)}+\lambda_2} \longrightarrow \text{своей СВ (хотя формула та же)} \\ \boxed{\text{подуровни}} \\ \quad\vdots \\ \underline{E_n^{(0)}+\lambda_A} \end{array}\right.$$

Мы предположили полное несовп. сз — вырождение снято полностью, а если есть несколько совпадающих - вырождение снято частично.

Теория возмущений для близких уровней

Такого не бывает из-за усл. применимости для ТВ:

$$|\langle\psi_n^{(0)}|H_I|\psi_m^{(0)}\rangle| \ll |E_n^{(0)}-E_m^{(0)}|$$

А в случае близких уровней:

$$|\langle\psi_n^{(0)}|H_I|\psi_m^{(0)}\rangle| \sim |E_n^{(0)}-E_m^{(0)}|$$

Это можно обойти рассмотрев вырожденную сист. (в случае $\ll$). Можно (для $\sim$) взять другой H_0.

$\measuredangle$ 4 сост. и $H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & & & 0 \\ & E_2 & & \\ & & E_3 & \\ 0 & & & E_4 \end{pmatrix}$, и H_I

$$H = H_0 + H_I = \begin{pmatrix} E_1 & & & 0 \\ & E_1 & & \\ & & E_1 & \\ 0 & & & E_1 \end{pmatrix} + H_I + \begin{pmatrix} 0 & & & 0 \\ & E_2-E_1 & & \\ & & E_3-E_1 & \\ 0 & & & E_4-E_1 \end{pmatrix}$$

Теперь невозмущ. гамильтониан $\tilde{H}_0$, а возмущение $\tilde{H}_I = H_I + \begin{pmatrix} 0 & & & 0 \\ & E_2-E_1 & & \\ & & E_3-E_1 & \\ 0 & & & E_4-E_1 \end{pmatrix}$

Вариационные методы

(вар. принцип Ритца и вар. метод Ритца)

$$\Phi(\psi) = \int dx\, \psi^*(x)\, A(x)\, \psi(x) \qquad \frac{\delta\psi(x)}{\delta\psi(y)} = \delta(x-y);\ \frac{\delta\psi^*(x)}{\delta\psi(y)} = 0.$$

$$\Rightarrow \delta\Phi(\psi) = \int dx (\delta\psi^*(x))\, A(x)\psi(x) + \int dx\, \psi^*(x) A(x) (\delta\psi^*(x)) \qquad (\psi^* \text{ и } \psi \text{ незав.})$$

$$\Rightarrow \frac{\delta}{\delta\psi^*(y)}\Phi(\psi) = \int dx \left[\frac{\delta\psi^*(x)}{\delta\psi^*(y)} A(x)\psi(x) + \cancelto{0}{\psi^* A(x) \frac{\delta\psi(x)}{\delta\psi^*(y)}} \right] =$$

$$= \int dx\, A(x)\psi(x)\delta(x-y) = A(y)\psi(y).$$

ВПР:

Пусть есть ∀ вектор гильбертова пр-ва $|\psi\rangle$. Определим функционал $\langle\psi|H|\psi\rangle$. Тогда экстремум этого функционала при доп. условии нормировки ($\langle\psi|\psi\rangle=1$) дает решение стац. уравнения Шредингера.

$$\Phi = \langle\psi|H|\psi\rangle - \underbrace{\lambda}_{\text{множитель Лагранжа}}(\langle\psi|\psi\rangle - 1)$$

Лекция 3

12 сентября

$$\frac{\delta\Phi}{\delta\lambda} = 0 = \langle\psi|\psi\rangle - 1$$

$$\frac{\delta\Phi}{\delta\langle\psi|} = H|\psi\rangle - \lambda|\psi\rangle = 0 \Rightarrow$$ λ − это энергия (это и есть док-во).

$$\frac{\delta\Phi}{\delta|\psi\rangle} = \langle\psi|H - \lambda\langle\psi| = 0$$

ВМР (метод!)

Берем пробную ВФ $|\psi(a,b,c,d,\dots)\rangle$, где $a,b,c,..$ − числовые пар-ры.

Экстремум $\langle\psi|H|\psi\rangle$ ищется по этому классу ВФ.

$\Rightarrow E = E(a,b,c,\dots)$, т.е. уже не функционал, а ф-я, нам необходимо теперь найти её минимум (вместо экстремума ф-ла).

$$E(a,b,c,..) = \langle\psi(a,b,c,\dots)|H|\psi(a,b,c,\dots)\rangle$$

Прибл. решение $|\psi(a_0,b_0,c_0,\dots)\rangle$, а энергия $E(a_0,b_0,c_0\dots)$

Точнее получается у энергии, т.к. мы её минимизируем.

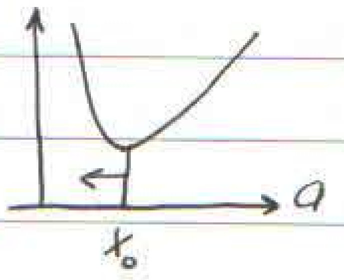
Пример: $H = \underbrace{\frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2}}_{H_0} + \underbrace{\alpha x^4}_{H_I}$ $\qquad H_0 \to |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} x_0}} e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}$ $\quad x_0^2 = \hbar/\sqrt{km}$

$\triangleleft\ \psi(x,a) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} a}} e^{-\frac{x^2}{2a^2}}$

$$\langle\psi(a)|H|\psi(a)\rangle = \underbrace{\frac{\hbar^2}{4ma^2} + \frac{ka^2}{4}}_{\min\ \text{при}\ a = x_0} + \alpha\frac{a^4}{4}\cdot 3$$

$$-\frac{2\hbar^2}{4m}\frac{1}{a^3} + \frac{ka}{2} + 3\alpha a^3 = 0$$

$$-\frac{2\hbar^2}{4m}\frac{1}{a^4} + \frac{k}{2} + 3\alpha a^2 = 0 \Rightarrow a_0$$



Ширина уменьшится^0

$$E \approx \frac{\hbar^2}{4ma_0^2} + \frac{ka_0^2}{4} + \alpha\frac{a_0^4}{4}\cdot 3$$

Так мы получим только осн. состояние. Чтобы работать с возб. уровнями, необх. модифицировать функционал так:

$$\Phi = \langle\psi|H|\psi\rangle + c\,|\langle\psi|\psi_0\rangle|^2$$ ↙ первое приближение

$c > |E_1 - E_0|$, чтобы в случае ор-ти ψ и ψ_0 сваливаться в E_0 из E_1.

Для второго приближения:

$$\Phi = \langle\psi|H|\psi\rangle + c|\langle\psi|\psi_0\rangle|^2 + c'|\langle\psi|\psi_1\rangle|^2$$

Улучшить результаты вар. метода можно с помощью $\triangleleft$ базиса в виде:

$$|\psi(a,b)\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} a}} e^{-\frac{x^2}{2a^2}} + b\cdot x^2 e^{-\frac{x^2}{2a^2}}\right) N(a,b).$$

Квазистатическое приближение
(Вентцеля, Крамерса, Бриллюэна – WKB)

$\triangleleft\ \psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi = 0$

$\triangleleft\ \psi = e^{if(x)}$

$$if''(x)e^{if(x)} + \frac{2m}{\hbar^2} e^{if(x)}(E - V(x)) + (i)^2(f')^2 e^{if(x)} = 0$$

0 приближение:

$$if'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x)) + (-f'^2) = 0$$

Будем считать, что $|f''| \ll (f')^2$, тогда

$$f' = \pm\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))} \equiv \pm k(x)$$

$$\Downarrow$$

$$|k'(x)| \ll k^2(x)$$

$\lambda \sim \frac{1}{k}$ - длина волны Де-Бройля $\Rightarrow$

$\boxed{|\lambda'| \ll 1 \text{ (λ Де-Бройля должна меняться медленно)}}$

условие применимость метода WKB.

$$\psi(x) = Ae^{+i\int k(x)dx} + Be^{-i\int k(x)dx}$$ - нулевое прибл.

(его есть смысл улучшить до 1ого, а до 2ого - нет.)

I приближение:

ψ $f = f_0 + f_1$, где $f_0 = \pm\int k(x)dx$.

$$if_0'' + if_1'' - (f_0' + f_1')^2 + k^2(x) = 0$$

$$if_0'' + \underset{\text{меньше, чем } f_0''}{\cancel{if_1''}} - \cancel{(f_0')^2} - 2f_0'f_1' - \underset{\text{второй пор-к}}{(f_1')^2} + \cancel{k^2(x)} = 0$$

$$if_0'' = 2f_0'f_1' \Rightarrow f_1' = \frac{i}{2}\frac{f_0''}{f_0'}$$

$$f_1 = \frac{i}{2}\ln f_0' \rightarrow e^{if_0 - \frac{1}{2}\ln \overset{=k(x)}{f_0'}}$$

$$\Rightarrow \boxed{\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{k(x)}}e^{i\int k(x)dx} + \frac{B}{\sqrt{k(x)}}e^{-i\int k(x)dx}}$$

УСЛ. ПРИМЕНИМОСТИ

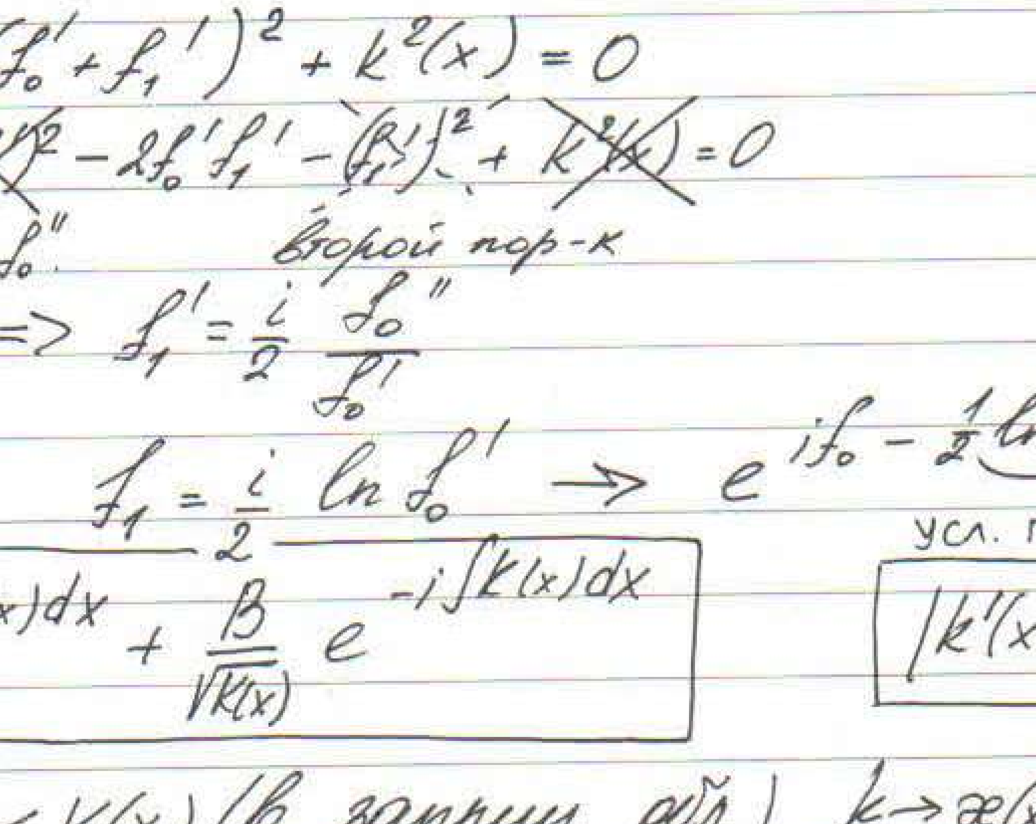
$$\boxed{|k'(x)| \ll k^2(x)}$$

В случае $E < V(x)$ (в запрещ. обл.) $k \to \varkappa(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V(x)-E)}$

и $\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{\varkappa(x)}}e^{i\int\varkappa(x)dx} + \frac{B}{\sqrt{\varkappa(x)}}e^{-i\int\varkappa(x)dx}$

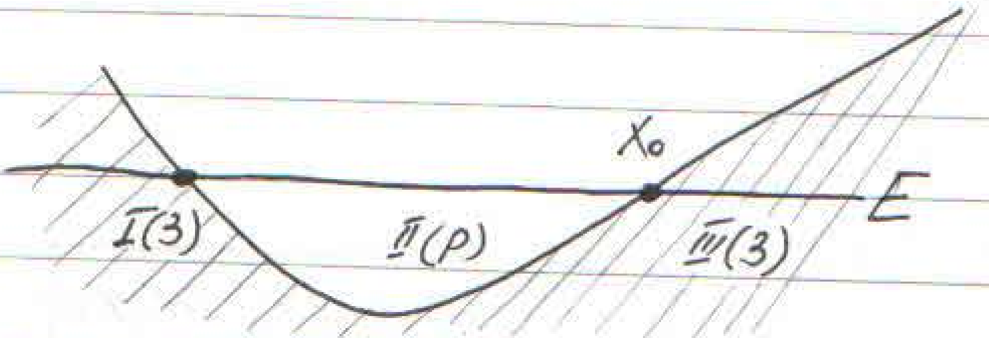
(усл. пр-ти $|\varkappa'(x)| \ll \varkappa^2(x)$)

Для случая:



решения в двух частях + сшивка

Классические точки поворота
(для стац. ур.-я Шред.)



Точка поворота : $k(x)=0$

$\varkappa(x)=0$

$V(x)=E$

WKB можно применять в обл II, отступя от точки поворота, в обл. I, отступя от т.п. и в обл III, отст. от т. п.

I и III - запрещ.

II - разреш.

Можно вывести условия сшивки (они не из непр.)

II-III $$\frac{1}{2\sqrt{\varkappa(x)}}\, e^{-\int_{x_0}^{x}\varkappa(x)dx} \longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \sin\left[\int_{x}^{x_0} k(x)dx + \frac{\pi}{4}\right]$$

(в III) (в II)

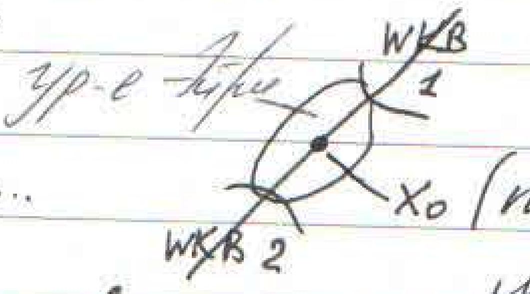
I-II $$\frac{1}{\sqrt{\varkappa(x)}}\, e^{\int_{x_0}^{x}\varkappa(x)dx} \longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \cos\left[\int_{x}^{x_0} k(x)dx + \frac{\pi}{4}\right]$$

(в I) (в II)

Идея сшивки:

Выясняем где завершаются области применимости в запр. и разр. обл-ти

$V(x) = V(x_0) + V'(x_0)\cdot(x-x_0) + \ldots$



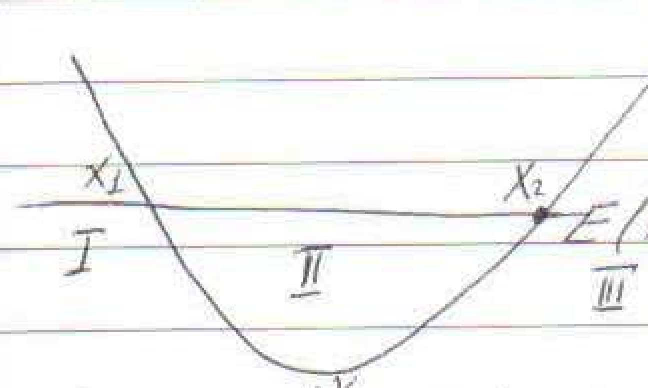
Оказывается, что в $1 \sim e^{-\int}$, а в $2 \sim \sin$ и наоборот в $1 \sim e^{+\int}$, а в $2 \sim \cos$.

Лекция 4

16 сент.

Задачи:

1) Усл. квантования Бора-Зоммерфельда



(гладкий)

E (энергия уровня или нет?)

(II) $\frac{1}{2\sqrt{\varkappa(x)}} e^{-\int_{x_2}^{x} \varkappa(x)dx}$

(I) $\frac{1}{2\sqrt{\varkappa(x)}} e^{-\int_{x}^{x_1} \varkappa(x)dx}$

(II) $\psi_l = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \sin\left(\int_{x_1}^{x} k(x)dx + \frac{\pi}{4}\right)$ (в x_1) и

$$\psi_R = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \sin\left(\int_{x}^{x_2} k(x)dx + \frac{\pi}{4}\right) \text{(в } x_2)$$

$W(\psi_l, \psi_R) = \psi_l' \psi_r - \psi_l \psi_r' = \left| \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \text{ не дифф-ем в силу } |k'| \ll k^2 \right| =$

$$= \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \cos\left(\int_{x_1}^{x} k(x)dx + \frac{\pi}{4}\right) \cdot k(x) \cdot \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \sin\left(\int_{x}^{x_2} k(x)dx + \frac{\pi}{4}\right) -$$

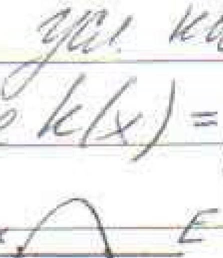
$$- \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \sin\left(\int_{x_1}^{x} k(x)dx + \frac{\pi}{4}\right) \cdot \frac{1}{\sqrt{k(x)}} (-k(x)) \cos\left(\int_{x}^{x_2} k(x)dx + \frac{\pi}{4}\right) =$$

$$= \frac{k(x)}{k(x)} \sin\left(\int_{x_1}^{x} k(x)dx + \int_{x}^{x_2} k(x)dx + \frac{\pi}{2}\right) = \sin\left(\int_{x_1}^{x_2} k(x)dx + \frac{\pi}{2}\right) = 0$$

$$\Rightarrow \int^{x} k(x)dx + \frac{\pi}{2} = \pi n + \pi$$

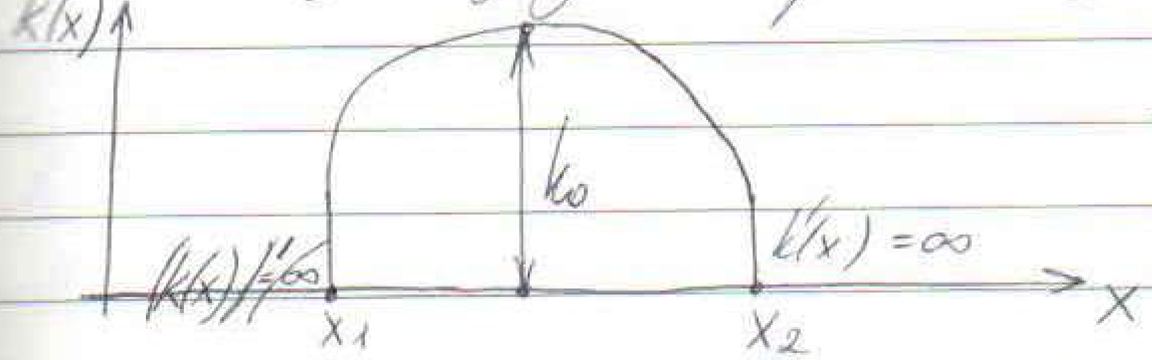
$\boxed{\int_{x_1}^{~~x_1~~ x_2} k(x)dx = \pi n + \frac{\pi}{2}}$ – усл. квантования Бора-Зоммерфельда

где $k(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))}$. $\boxed{n \gg 1}$

2) Туннелирование $e^{ikx} + Ae^{-ikx}$  Be^{ikx}

3) Двойная яма

Почему в задаче Бора-Зоммерфельда $n \gg 1$?



$\exists$ условие $k' \ll k^2$

$\left.\begin{array}{l} \Rightarrow k' \approx \frac{k_0}{x_2 - x_1} \\ k^2 \approx k_0^2 \end{array}\right] \Rightarrow k_0(x_2 - x_1) \gg 1.$

$$k_0(x_2-x_1)\approx\int_{x_1}^{x_2}k(x)dx$$ (оценка для интеграла)

$\Rightarrow \pi(n+1/2)\gg1 \Rightarrow n\gg1$

Нормировка?

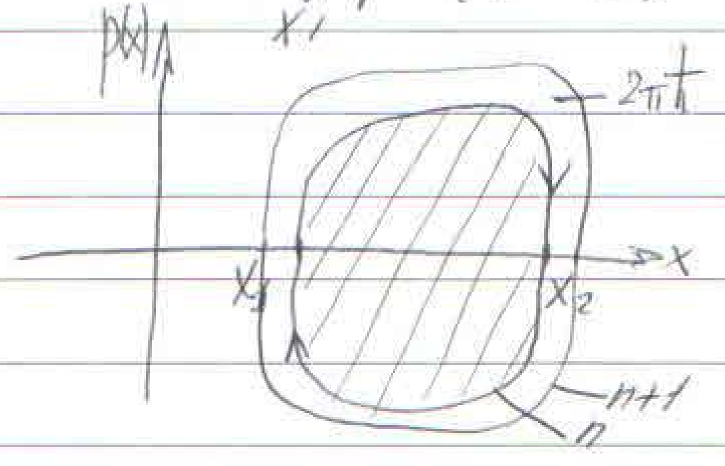
$$\psi=N\frac{1}{\sqrt{k(x)}}\sin\left[\int_{x_1}^{x}k(x)dx+\frac{\pi}{4}\right]$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2dx\approx\int_{x_1}^{x_2}|\psi|^2dx\Rightarrow\int_{x_1}^{x_2}N^2\frac{1}{\boxed{k(x)}}\sin^2\overbrace{\left[\int_{x_1}^{x}K(\tilde{x})d\tilde{x}+\frac{\pi}{4}\right]}^{1/2}dx=$$

медленно меняется

$$=\int_{x_1}^{x_2}N^2\frac{1}{k(x)}\frac{1}{2}dx=\int_{x_1}^{x_2}\frac{N^2}{2}\frac{dx}{\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(x))}}=$$

$$=\frac{N^2\hbar}{2m}\int_{x_1}^{x_2}\frac{dx\cdot m}{\sqrt{2m(E-V(x)}}=\frac{N^2\hbar}{2m}\int_{x_1}^{x_2}\frac{dx}{v(x)}=\frac{N^2\hbar}{2m}\frac{T}{2}=1$$



$$\int_{x_1}^{x_2}p(x)dx=\pi\hbar(n+1/2)$$

$$\oint p(x)dx=2\pi\hbar(n+1/2)$$

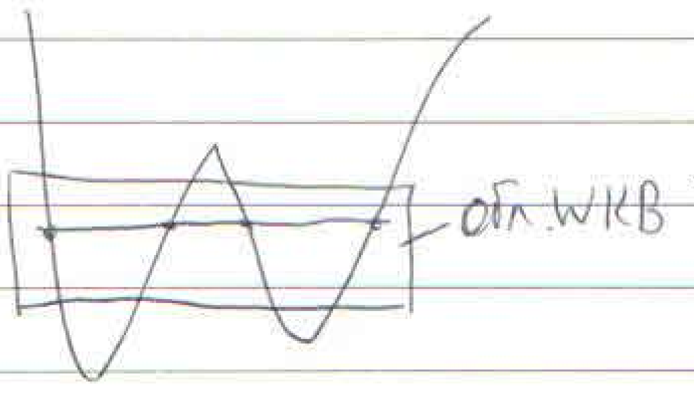
$n\to n+1$

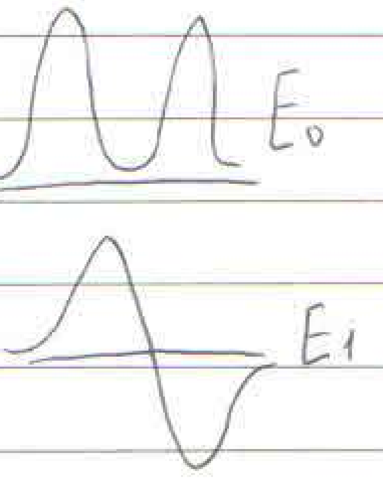
в 3-ехмерии $2\pi\hbar\to(2\pi\hbar)^3$

к 2) $R=\frac{1}{1+D}=1-D$ где $D=e^{-2\int_{x_1}^{x_2}\varkappa(x)dx}$

$T=\frac{D}{1+D}=D$

к 3)



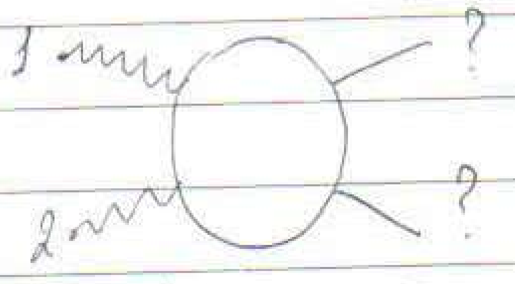


|| Тождественные частицы

Тожд. частицы — частицы один. массы, один. спины, заряды и прочее.

Принцип неразл. ТЧ.

Если в произв. сост. поменять местами ТЧ, то сост. системы не изменится (из-за отсутствия траекторий)



Оператор перестановки двух частиц P_{12}.

$$P_{12} \cdot \psi(x_1, x_2) \equiv \psi(x_2, x_1) = e^{i\alpha}\psi(x_1, x_2)$$

что угодно, хар-щее частицу.

$$P_{12}^2\psi(x_1, x_2) = \psi(x_1, x_2) = (e^{i\alpha})^2\psi(x_1, x_2)$$

$$\Rightarrow e^{i\alpha} = \pm 1 \Rightarrow \left[\begin{array}{ll} +1 & \text{БОЗОН (целый спин)} \\ -1 & \text{ФЕРМИОН (полуцелый)} \end{array}\right.$$

Надувательство в том, что никто не говорит, что будет в каждой ситуации опред знак, теория предск. единц-е ±1. Но корректно можно доказать (в поле; квантование поля дает целые спины бозонов, если оно с целым спином; кв. полуцелого спина дает фермионы).

БОЗОНЫ	ФЕРМИОНЫ
фотоны	e, μ, τ + (античастицы)
$W^{\pm}$; Z, $3=2^2-1$	ν_e, ν_μ, ν_τ
g (глюоны) $3^2-1=8$	$\begin{bmatrix} u & c & t \\ d & s & b \end{bmatrix}$ кварки

Лекция 5

23 сентября

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_n(x_1)\psi_m(x_2) \pm \psi_n(x_2)\psi_m(x_1)\right) \leftrightarrow E_n + E_m \text{ (нет вы-ия!)}$$

Базис в пространстве ТЧ.

a) $\underbrace{PY}_{N}$ $\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2) \dots \psi_{n_N}(x_N)$

$\psi_{n_1}(x_1)$ — ∀ базис, не обяз. реш. УШ

x_1 — ∀ пар-р.

б) фермионы, нам нужна полная антисим. (ПАС)

$$\left(\left(\begin{array}{l}\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_P (-1)^{C_P}\psi_{n_1}(x_{p_1})\psi_{n_2}(x_{p_2})\dots\psi_{n_N}(x_{p_N}) \leftarrow \text{опред. Слетера} \\ \text{(можно переставлять и по } n_i\text{, и по } p_i\text{)} \\ \frac{1}{\sqrt{N!}}\det\|\psi_{n_i}(x_j)\|_{N\times N}\end{array}\right.\right.$$

в) бозоны, нам нужна полная симметр-ть (ПС)

$$\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_P \psi_{n_1}(x_{p_1})\psi_{n_2}(x_{p_2})\dots\psi_{n_N}(x_{p_N})\frac{1}{\sqrt{m_1!\,m_2!\dots m_M!}}$$

Что с условием норм-ки?

$\measuredangle\ N=3$ $\quad n_1=n_2=1,\ n_3=2$

$$\frac{1}{\sqrt{6}}\left[2\psi_1(x_1)\psi_1(x_2)\psi_2(x_3)+2\psi_1(x_1)\psi_1(x_3)\psi_2(x_2)+\right.$$
$$\left.+2\psi_1(x_2)\psi_1(x_3)\psi_2(x_1)\right]\frac{1}{\sqrt{2!}}$$

m_i - кол-во совп. частиц

$N=m_1+m_2+\dots+m_M$

Наблюдаемые в пространстве ТЧ

2 спина $|\psi\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle-|\downarrow\uparrow\rangle)\rightarrow S=0$

$\hat{S}_z^{(1)}$ - не наблюдаемая, т.к. $\exists$ выход из пространства

$\hat{S}_z^{(1)}\psi=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{1}{2}\right)|\uparrow\downarrow\rangle-\frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{1}{2}\right)|\downarrow\uparrow\rangle=\frac{1}{2\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle)$, а такой ВФ не бывает. С физ. точки зрения у нас 2 частицы неразличимы, а значит что такое (1)?

Можно найти $S_z^{(1)}+S_z^{(2)}$, $S_z^{(1)}\cdot S_z^{(2)}$

Ÿ. Набл. в пр-ве ТЧ должны быть ПС относ. перест. $\forall$ пары част.

Док-во: $\langle\psi|A|\psi\rangle\xrightarrow[i\leftrightarrow j]{}\langle\tilde{\psi}|\tilde{A}|\tilde{\psi}\rangle\underset{\text{в силу нера зич.}}{=}\langle\psi|A|\psi\rangle=\cancel{(\pm1)}\langle\psi|\tilde{A}|\psi\rangle\cancel{(\pm1)}$

$\Rightarrow$ Матр. эл-ты A и $\tilde{A}$ совпадают

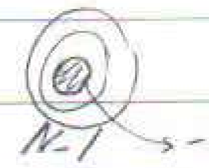
$\Rightarrow\tilde{A}=A$

Многоэлектронный атом (МЭА)

$$H=\underbrace{\sum_{k=1}^{N}\left(\frac{p_k^2}{2m}-\frac{Ze^2}{r_k}\right)}+\sum_{k<l}\frac{e^2}{r_{kl}} \qquad N\equiv Z$$

N штук не взаим.
эл-в, вз-их с ядром

Добавку нельзя ∡ как поправку к H_0 по ТВ, т.к.



$-\frac{e^2}{r}$ (далеко)

$-\frac{Ze^2}{r}$ (близко)

Из спектроскопии известно, что n и l в многоэл. атоме имеют место. Причем, например, 3d выше 4s (из разной величины экранирования)

Приближение центрального поля

$$\measuredangle\ H=\underbrace{\sum_{k=1}^{N}\left(\frac{p_k^2}{2m}+V(r_k)\right)}_{H_0}-\underbrace{\sum_{k=1}^{N}\left(V(r_k)+\frac{Ze^2}{r_k}\right)+\sum_{k<l}\frac{e^2}{r_{kl}}}_{H_I}$$

самосогл. центр сим. потенциал.

$$V^{(0)}(r_k)=-\frac{Ze^2}{r_k};\ |\psi^{(0)}\rangle=\psi_{n_1l_1m_1}(r_1)|\downarrow\rangle_1\ \psi_{n_2l_2m_2}(r_2)|\uparrow\rangle_2\cdots\cdots\psi_{n_Nl_Nm_N}(r_N)|\uparrow\rangle_N]_{\text{ПАС}}$$

$$V(\bar{x})\rightarrow V(r)\equiv\langle V(\bar{x})\rangle_{\theta,\varphi}=V^{(1)}(r)$$

пот. в котором живет частица из (0)

сфер. сим.

$$V^{(1)}(r_k)\rightarrow\tilde{\psi}_{n,l,m}(r_k)\Rightarrow|\psi^{(1)}\rangle=[\tilde{\psi}_{n_1l_1m_1}(r_1)|\downarrow\rangle_1\psi_{n_2l_2m_2}(r_2)|\uparrow\rangle_2\ldots\psi_{n_Nl_Nm_N}(r_N)|\uparrow\rangle_N]_{\text{ПАС}}$$

не кул. ВФ, поэтому „~"

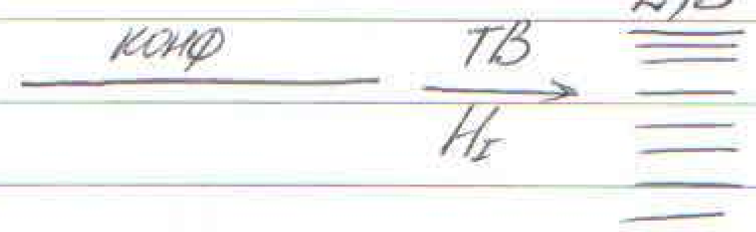
$$|\psi^{(0)}\rangle=\text{ПАС}[\tilde{\psi}_{n_1l_1m_1}(r_1)|\uparrow\rangle_1\ldots\ldots\tilde{\psi}_{n_Nl_Nm_N}(r_N)|\uparrow\rangle_N]$$

Опред. Слэтера?

$$E^{(0)}=E_{n_1l_1}+\ldots+E_{n_Nl_N}\quad \Big(\text{мы вырожд. по } \begin{matrix}m_1,\ldots,m_N\\ \underset{\pm 1/2}{m_{s_1}},\ldots,m_{s_N}\end{matrix}\Big)$$

Набор кв. чисел $n_1l_1, \dots, n_Nl_N$ – конфигурация – те кв. числа, которые дают 0 приб в прибл. центр. поля

$L, S \leftarrow (2L+1)(2S+1)$ шт



$\left(\begin{matrix} L \\ S \end{matrix}\right)$ $L_z(=2L+1$ шт$)$ $S_z(=2S+1$шт$)$

~хор.

$[\vec{S}^5, H] = 0$ (т.к. нет в H матриц паули), но $\vec{S}^5$ не инт. движения, т.к. $\vec{S}^5$ не набл.

Какие задачи можем решить?

$\boxed{1.}$ По данной конф сказать на какие термы расщ?

$\boxed{2}$ Явный вид ВФ терма? (через $\tilde{\psi}$)

$\boxed{3}$ Как термы упор. по энергиям.

$\boxed{62}$ $2p^2 = 1s^2 2s^2 2p^2$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\tilde{\psi}_{21\boxed{-1}}(r_1)|\boxed{\downarrow}\rangle_1 \tilde{\psi}_{21\boxed{0}}(r_2)|\boxed{\uparrow}\rangle_2 - \tilde{\psi}_{21-1}(r_2)|\downarrow\rangle_2 \tilde{\psi}_{210}(r_1)|\uparrow\rangle_1\right) ⊜$$

Обозначение:

$$⊜ \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ \downarrow & \uparrow \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix}$$

$$l_z|l, m=l\rangle = l|l, m=l\rangle$$
$$l_+|l, m=l\rangle = 0$$

$$\left.\begin{aligned} L_+|\psi\rangle &= 0 \\ S_+|\psi\rangle &= 0 \\ L_z|\psi\rangle &= L|\psi\rangle \\ S_z|\psi\rangle &= S|\psi\rangle \end{aligned}\right\}$$ $|\psi\rangle$ – старший вектор терма

$$|\psi\rangle = |\text{конф.}, L, \underset{L_z}{\overset{\shortparallel}{M_L}} = L, S, \underset{S_z}{\overset{\shortparallel}{M_S}} = S\rangle$$

У нас старший вектор терма $\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix}$, или $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \uparrow & \uparrow \end{pmatrix}$

Лекция 6

26 сентября

$2p^2$ $\begin{pmatrix}1 & 1\\ \uparrow & \downarrow\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}1 & 0\\ \uparrow & \uparrow\end{pmatrix}$

$$\begin{cases} m_{s_1}+m_{s_2}=0 \\ m_1+m_2=0 \end{cases}$$

$L=2$ ^1D $L=1$ ^3P $L=0$ ^1S $\Rightarrow$

$S=0$ $S=1$ $S=0$

5 9 1

$\Downarrow$

$\begin{pmatrix}0 & 0\\ \uparrow & \downarrow\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}1 & -1\\ \uparrow & \downarrow\end{pmatrix}$

$$\psi=|L=0,\ S=0,\ S=0,\ M_S=0\rangle = a\begin{pmatrix}0 & 0\\ \uparrow & \downarrow\end{pmatrix}+b\begin{pmatrix}1 & -1\\ \uparrow & \downarrow\end{pmatrix}+c\begin{pmatrix}-1 & +1\\ \uparrow & \downarrow\end{pmatrix}$$

$$S_+|\psi\rangle=(S_+^{(1)}+S_+^{(2)})|\psi\rangle = a\begin{pmatrix}0 & 0\\ \uparrow & \uparrow\end{pmatrix}+b\begin{pmatrix}1 & -1\\ \uparrow & \uparrow\end{pmatrix}+c\begin{pmatrix}-1 & 1\\ \uparrow & \uparrow\end{pmatrix}\Rightarrow b=c.$$

$$L_+|\psi\rangle=(l_+^{(1)}+l_+^{(2)})|\psi\rangle=\left|\begin{array}{l} l_+|l=1\ m=1\rangle=0 \\ l_+|l=1\ m=0\rangle=\sqrt{2}\,|l=1\ m=1\rangle \\ l_+|l=1\ m=-1\rangle=\sqrt{2}\,|l=1\ m=0\rangle \end{array}\right| = a\sqrt{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ \uparrow & \downarrow\end{pmatrix}+$$

$$+a\sqrt{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ \uparrow & \downarrow\end{pmatrix}+b\sqrt{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ \uparrow & \downarrow\end{pmatrix}+c\sqrt{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ \uparrow & \downarrow\end{pmatrix}=(a\sqrt{2}+b\sqrt{2})\begin{pmatrix}1 & 0\\ \uparrow & \downarrow\end{pmatrix}+$$

$$+(a\sqrt{2}+a\sqrt{2})\begin{pmatrix}0 & 1\\ \uparrow & \downarrow\end{pmatrix}$$

$$\left.\begin{array}{l} a+b=0 \\ a+c=0 \\ b=c \end{array}\right]\ a=-b=-c=\frac{1}{\sqrt{3}}$$

$$\Rightarrow|\psi\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix}0 & 0\\ \uparrow & \downarrow\end{pmatrix}-\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix}1 & -1\\ \uparrow & \downarrow\end{pmatrix}-\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix}-1 & 1\\ \uparrow & \downarrow\end{pmatrix}\ \text{соотв.}\ {}^1S.$$

Для всех других к-в ∃ другая техника нахождения волн. функции.

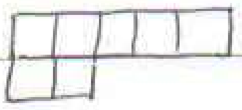
Диаграмма Юнга.

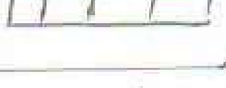
(вообще многозначные, мы ∠ одно- и двухзначные)

Диагр. Юнга в отношении многоэл. атомах наз. одна из двух картинок.

1. nl^k 

ограничение $2l+1$

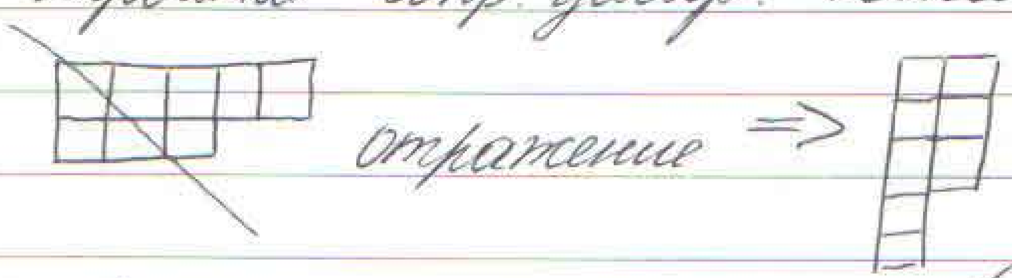
2. nl^k 
причем 2ая строка не длиннее 1ой, каждая не длиннее $2l+1$

(возможно )

Это спиновая диаграмма Юнга.

Как пользоватся?

1. Берется одна + диагр. Юнга и в ней всевозм. способами расст. кв. числа $m_S (2^k)$
2. Операции: расстановку (все 2^k) необх. полностью симметр. по 1ой строке (потом по 2ой, если есть), то, что получилось ПАС по 1ому столбцу; ПАС по 2ому столбцу и т.д. по столбцам.
3. Выделяется ЛНЗ результат
4. У всех ЛНЗ расстановок вычисл. M_S, сооружаем S($\underset{\sim}{1}\ \underset{\sim}{0}\ 0\ \underset{\sim}{-1} \rightarrow 1, 0$)
5. Строится сопр. диагр. Юнга - коорд. диагр. Юнга.



6. 1, только не m_s, а m_l, $(2l+1)^k$ расстановок.
7. Повторяем пункты 2 и 3
8. 4, только не M_S, а M_L, затем сооружаем L.

Иллюстрация для $2p^2$

15 сост (^1D, ^3P, ^1S)

M_S

4 $\boxed{\uparrow|\uparrow} \xrightarrow{ПС} 2\boxed{\uparrow|\uparrow}$ 1

$\boxed{\uparrow|\downarrow} \xrightarrow{ПС} \boxed{\uparrow|\downarrow} + \boxed{\downarrow|\uparrow}$ 0

$\boxed{\downarrow|\uparrow} \xrightarrow{ПС} \nearrow$

$\boxed{\downarrow|\downarrow} \xrightarrow{ПС} 2\boxed{\downarrow|\downarrow}$ −1

$\} S=1$

M_L

4 $\boxed{\begin{smallmatrix}1\\1\end{smallmatrix}} \xrightarrow{ПАС} \boxed{\begin{smallmatrix}1\\1\end{smallmatrix}} - \boxed{\begin{smallmatrix}1\\1\end{smallmatrix}} = 0$

$\boxed{\begin{smallmatrix}1\\0\end{smallmatrix}} \xrightarrow{ПАС} \boxed{\begin{smallmatrix}1\\0\end{smallmatrix}} - \boxed{\begin{smallmatrix}0\\1\end{smallmatrix}}$ 1

$\boxed{\begin{smallmatrix}0\\1\end{smallmatrix}} \xrightarrow{ПАС} \boxed{\begin{smallmatrix}0\\1\end{smallmatrix}} - \boxed{\begin{smallmatrix}1\\0\end{smallmatrix}}$ – ЛНЗ

$\boxed{\begin{smallmatrix}1\\-1\end{smallmatrix}} \longrightarrow \boxed{\begin{smallmatrix}1\\-1\end{smallmatrix}} - \boxed{\begin{smallmatrix}-1\\1\end{smallmatrix}}$ 0

$\boxed{\begin{smallmatrix}0\\-1\end{smallmatrix}} \rightarrow \boxed{\begin{smallmatrix}0\\-1\end{smallmatrix}} - \boxed{\begin{smallmatrix}-1\\0\end{smallmatrix}}$ −1

$\} L=1$

из $\boxed{\ \ |\ \ }$ получили терм ^3P

из $\begin{array}{|c|}\hline \ \\ \hline \ \\ \hline\end{array}$ ($\begin{array}{|c|}\hline \uparrow \\ \hline \downarrow \\ \hline\end{array} \rightarrow S=0$ и $M_L = \underset{\boxed{1\,1}}{2}, \overset{\boxed{1\,0}}{1}, \underset{\boxed{1\,-1}}{0}, \overset{\boxed{0\,0}}{\textcircled{0}}, \underset{\boxed{0\,-1}}{-1}, \overset{\boxed{-1\,-1}}{-2} \Rightarrow \begin{matrix} L=2 \\ L=0 \end{matrix}$) т. ${}^1D$ и ${}^1S$

Правила для $\begin{array}{|c|c|}\hline a & b \\ \hline c \\ \cline{1-1}\end{array}$ (симметр. св-ва):

1. $\begin{array}{|c|c|}\hline a & b \\ \hline c \\ \cline{1-1}\end{array} \xrightarrow{ПС} \begin{array}{|c|c|}\hline a & b \\ \hline c \\ \cline{1-1}\end{array} + \begin{array}{|c|c|}\hline b & a \\ \hline c \\ \cline{1-1}\end{array} \rightarrow \begin{array}{|c|c|}\hline a & b \\ \hline c \\ \cline{1-1}\end{array} - \begin{array}{|c|c|}\hline c & b \\ \hline a \\ \cline{1-1}\end{array} + \begin{array}{|c|c|}\hline b & a \\ \hline c \\ \cline{1-1}\end{array} - \begin{array}{|c|c|}\hline c & a \\ \hline b \\ \cline{1-1}\end{array}$.

$\begin{array}{|c|c|}\hline a & a \\ \hline a \\ \cline{1-1}\end{array} \rightarrow 0 \Rightarrow$ полностью один „уголки" выписывать нет смысла

2. $\begin{array}{|c|c|}\hline a & a \\ \hline b \\ \cline{1-1}\end{array} \rightarrow 2\begin{array}{|c|c|}\hline a & a \\ \hline b \\ \cline{1-1}\end{array} - 2\begin{array}{|c|c|}\hline b & a \\ \hline a \\ \cline{1-1}\end{array}$ ⇒ из 3-ех ост. 1.

$\begin{array}{|c|c|}\hline b & a \\ \hline a \\ \cline{1-1}\end{array} \rightarrow \begin{array}{|c|c|}\hline b & a \\ \hline a \\ \cline{1-1}\end{array} + \cancel{\begin{array}{|c|c|}\hline a & b \\ \hline a \\ \cline{1-1}\end{array}} - \begin{array}{|c|c|}\hline a & a \\ \hline b \\ \cline{1-1}\end{array} - \cancel{\begin{array}{|c|c|}\hline a & b \\ \hline a \\ \cline{1-1}\end{array}}$ ЛЗ с 1ой

$\begin{array}{|c|c|}\hline a & b \\ \hline a \\ \cline{1-1}\end{array} \rightarrow \cancel{\begin{array}{|c|c|}\hline a & b \\ \hline a \\ \cline{1-1}\end{array}} + \begin{array}{|c|c|}\hline b & a \\ \hline a \\ \cline{1-1}\end{array} - \cancel{\begin{array}{|c|c|}\hline a & b \\ \hline a \\ \cline{1-1}\end{array}} - \begin{array}{|c|c|}\hline a & a \\ \hline b \\ \cline{1-1}\end{array}$ ЛЗ с 2ой

3. 6 штук:

$\begin{array}{|c|c|}\hline a & b \\ \hline c \\ \cline{1-1}\end{array} \rightarrow \begin{array}{|c|c|}\hline a & b \\ \hline c \\ \cline{1-1}\end{array} - \begin{array}{|c|c|}\hline c & b \\ \hline a \\ \cline{1-1}\end{array} + \begin{array}{|c|c|}\hline b & a \\ \hline c \\ \cline{1-1}\end{array} - \begin{array}{|c|c|}\hline c & a \\ \hline b \\ \cline{1-1}\end{array}$

$\begin{array}{|c|c|}\hline b & a \\ \hline c \\ \cline{1-1}\end{array} \nearrow$

$\begin{array}{|c|c|}\hline a & c \\ \hline b \\ \cline{1-1}\end{array} \rightarrow \begin{array}{|c|c|}\hline a & c \\ \hline b \\ \cline{1-1}\end{array} + \begin{array}{|c|c|}\hline c & a \\ \hline b \\ \cline{1-1}\end{array} - \begin{array}{|c|c|}\hline b & c \\ \hline a \\ \cline{1-1}\end{array} - \begin{array}{|c|c|}\hline b & a \\ \hline c \\ \cline{1-1}\end{array}$

$\begin{array}{|c|c|}\hline c & a \\ \hline b \\ \cline{1-1}\end{array} \nearrow$

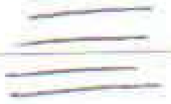
$\begin{array}{|c|c|}\hline b & c \\ \hline a \\ \cline{1-1}\end{array} \rightarrow \begin{array}{|c|c|}\hline b & c \\ \hline a \\ \cline{1-1}\end{array} + \begin{array}{|c|c|}\hline c & b \\ \hline a \\ \cline{1-1}\end{array} - \begin{array}{|c|c|}\hline a & c \\ \hline b \\ \cline{1-1}\end{array} - \begin{array}{|c|c|}\hline a & b \\ \hline c \\ \cline{1-1}\end{array}$

$\begin{array}{|c|c|}\hline c & b \\ \hline a \\ \cline{1-1}\end{array} \nearrow$

$\Big\} \oplus \equiv 0$

⇒ 3 строка ЛЗ (3я = −1ой 2ой)

⇒ из 6-ти выживают 2.

$\boxed{3}$ конф $\xrightarrow[ТВ]{H_I}$ 

I ПРАВИЛО ХУНДА: Чем больше спин, тем меньше E
↑S, ↓E

II ПРАВИЛО ХУНДА: При равных S чем больше L, тем м. E
$S_1=S_2$: ↑L, ↓E

Лекция 7

30 сентября

I Док-во 1 правила Хунда (от правильного к неправильному)

Начнем с иллюстрации:

$$2p^2 \quad \begin{pmatrix}1 & 1\\ \uparrow & \downarrow\end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix}1 & 0\\ \uparrow & \uparrow\end{pmatrix}$$

$$\frac{\text{конф}}{H_0} \xrightarrow[H_I]{\text{Т.В}} \left.\begin{matrix}\text{———}\\ \text{———}\\ \text{———}\end{matrix}\right\}$$

(в приближ. самосогл. поля)

$$\langle L'S'M_L'M_S' | H_I | L S M_L M_S \rangle = \delta_{LL'}\delta_{MM'}\delta_{M_L M_L'}\delta_{M_S M_S'} \cdot f(L, S)$$

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix}1 & 0\\ \uparrow & \uparrow\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\left(\tilde{\psi}_{211}(r_1)\tilde{\psi}_{210}(r_2) - \tilde{\psi}_{211}(r_2)\tilde{\psi}_{210}(r_1)\right)|\uparrow\uparrow\rangle$$

не кулон. ВФ!

$$H_I = \underset{\sim}{-V(r_1)}\underset{\sim}{-V(r_2)} - \underset{\sim}{\frac{Ze^2}{r_1}} - \underset{\sim}{\frac{Ze^2}{r_2}} + \frac{e^2}{r_{12}}$$

в этих слагаемых расщепления не будет, но можно показать.

$\propto \frac{e^2}{r_{12}}$:

$$\langle\psi|\frac{e^2}{r_{12}}|\psi\rangle = \int d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \langle\uparrow\uparrow|\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\tilde{\psi}^*_{211}(r_1)\tilde{\psi}^*_{210}(r_2) - \underbrace{\tilde{\psi}^*_{211}(r_2)\tilde{\psi}^*_{210}(r_1)}\right) * \frac{e^2}{r_{12}} * \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\tilde{\psi}_{211}(r_1)\tilde{\psi}_{210}(r_2) - \tilde{\psi}_{211}(r_2)\tilde{\psi}_{210}(r_1)\right)\cdot$$

$$\cdot\underset{\sim}{|\uparrow\uparrow\rangle} = \Big| \langle\uparrow\uparrow|\uparrow\uparrow\rangle = 1 \Big| = \int d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \left(\tilde{\psi}^*_{211}(r_1)\tilde{\psi}^*_{210}(r_2)\right) * \frac{e^2}{r_{12}} *$$

$$* \left(\tilde{\psi}_{211}(r_1)\tilde{\psi}_{210}(r_2) - \tilde{\psi}_{211}(r_2)\tilde{\psi}_{210}(r_1)\right) = \underbrace{\int d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 |\tilde{\psi}_{210}(r_1)|^2 |\tilde{\psi}_{21\textcircled{0}}(r_2)|^2 \frac{e^2}{r_{12}}} -$$

K_{10} – кулоновский интеграл

(физ. смысл – ~~кул от~~ средн. зн. парного кул отталк.)

$$-\underbrace{\int d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \tilde{\psi}^*_{211}(r_1)\tilde{\psi}_{210}(r_1)\tilde{\psi}^*_{210}(r_2)\tilde{\psi}_{211}(r_2)\frac{e^2}{r_{12}}}$$

I_{10} – обменной интеграл

$$S=1: \begin{pmatrix}1 & 0\\ \uparrow & \uparrow\end{pmatrix} \quad K_{10} - I_{10} \quad (I_{10} \text{ знак?})$$

$$S=0: \begin{pmatrix}1 & 1\\ \uparrow & \downarrow\end{pmatrix}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\overset{||}{\tilde{\psi}_{211}}(r_1)\tilde{\psi}_{211}(r_2)\left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right) = |\xi\rangle \Rightarrow \langle\xi|\frac{e^2}{r_{12}}|\xi\rangle$$

Нужно отступить на шаг вниз и $\sphericalangle$ $L_-|\xi\rangle$:

$$L_-|\xi\rangle = \sqrt{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ \uparrow & \downarrow\end{pmatrix} + \sqrt{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ \uparrow & \downarrow\end{pmatrix} = \sqrt{4}\,|\underbrace{L=2, M_L=1, S=0, M_S=0}_{|x\rangle}\rangle$$

$$|\chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0 & 1\\ \uparrow & \downarrow\end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 0\\ \uparrow & \downarrow\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\tilde{\psi}_{210}(r_1)\tilde{\psi}_{211}(r_2) + \tilde{\psi}_{210}(r_2)\tilde{\psi}_{211}(r_1)\right)\frac{1}{\sqrt{2}}\cdot$$

$$\cdot\left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right)$$

$$\langle\chi|\frac{e^2}{r_{12}}|\chi\rangle = K_{10} + I_{10}$$

$S=0$: $K_{10} + I_{10}$

$2p^3$ $\begin{pmatrix}1 & 0 & -1\\ \uparrow & \uparrow & \uparrow\end{pmatrix} \leftarrow S = 3/2$

$$\underbrace{\langle\psi|}_{6}\underbrace{\frac{e^2}{r_{12}} + \frac{e^2}{r_{23}} + \frac{e^2}{r_{13}}}_{3}\underbrace{|\psi\rangle}_{6} = K_{10} + K_{1-1} + K_{-10} - I_{10} - I_{1-1} - I_{10}$$

меньше

$\begin{pmatrix}1 & 1 & 0\\ \uparrow & \downarrow & \uparrow\end{pmatrix} \leftarrow S = 1/2$

L_- действуем 2 раза (чтобы получить 1 0 -1), получаем $|L=2, M_L=0, S=1/2, M_S=1/2\rangle$

$$\frac{2}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix}1 & 0 & -1\\ \uparrow & \downarrow & \uparrow\end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix}0 & 1 & -1\\ \uparrow & \downarrow & \uparrow\end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix}1 & -1 & 0\\ \uparrow & \downarrow & \uparrow\end{pmatrix} = |\chi\rangle$$

$$\langle\psi|\frac{e^2}{r_{12}} + \frac{e^2}{r_{23}} + \frac{e^2}{r_{13}}|\chi\rangle = K_{10} + K_{1-1} + K_{-10} + \frac{1}{2}I_{01} + \frac{1}{2}I_{0-1} - I_{1-1}$$

Можно заменить так: (II док-во)

$$H_{eff} = K_{12} + I_{12}(1 - \vec{S}^2) = K_{12} + I_{12}(1 - \underbrace{\vec{S}_1^2}_{3/4} - \underbrace{\vec{S}_2^2}_{3/4} - 2\vec{S}_1\vec{S}_2) = K_{12} - I_{12}\left(\frac{1}{2} + 2\cdot\vec{S}_1\vec{S}_2\right),$$

где $\left(\frac{1}{2} + 2\vec{S}_1\vec{S}_2\right) = P_{12}$ − оператор перестановки двух спинов.

Для N электронов: $H_{eff} = \sum_{a<b}\left[K_{ab} + I_{ab}\left(-\frac{1}{2} - 2\vec{S}_a\vec{S}_b\right)\right]$

↗ дает непр. док-во 1ого правила Хунда.

Предположим, что $I_{ab} = I$ ∀ a и b (хотя в жизни они в точности не равны).

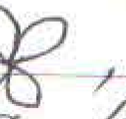
$$H_{eff} = \sum_{a<b}\left[K_{ab} - \frac{1}{2}I\right] - I\underbrace{\sum_{a<b}2\vec{S}_a\vec{S}_b - I\sum_a \vec{S}_a^2}_{I\vec{S}^2 = I(\sum_a \vec{S}_a)^2 =} + \underbrace{I\sum_a \vec{S}_a^2}_{I\cdot\frac{3N}{4}}$$

$\Rightarrow H_{eff} = \sum_{a<b} [K_{ab} - \frac{I}{2}] + I\frac{3}{4}N - I\vec{S}^2$ ← дает общее, но неправильное док-во. (I_ab по порядку совпадаю но точно нет).

III Док-во:

Чем больше спинов смотрят в одну сторону, тем больше слагаемых с ⊖.

Док-во 2 правила Хунда
↑L ↓E

Если для одной частицы $l=0$, то ВФ ○, если $l=1$, то ВФ 8 или ∞, если $l=2$ ВФ , т.е. чем больше l, тем быстрее осциллирует ВФ. (Лемма Римана: интегр.=0). Тоже самое наблюд. с L в 3N-мерном пр-ве: чем ↑L, тем сильнее осциллирует ВФ, а значит тем ↓ $\langle E_{кул} \rangle$, тем ↓E.

Тонкая структура термов.

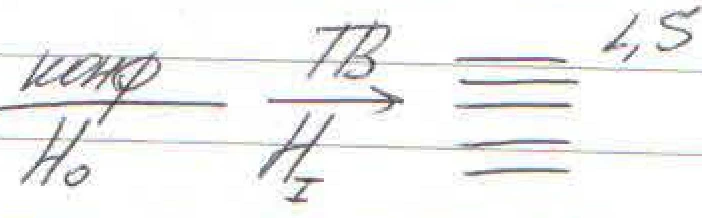
Речь о релятивистских поправках: к кин. эн (E^4, только сдвиг), ... (только сдвиг), H_{ls} (расщепление)

$$H_{ls} = \sum_{k=1}^{N} \underbrace{g(r_k)} \vec{l}_k \vec{s}_k$$

1) >0

2) чем ↑Z, тем ↑g

Докажем $\mathcal{H} = c\vec{L}\vec{S}$.



"$H_0 \gg H_I$"

Может возникнуть 3 ситуации:

1. „$H_I \gg H_{ls}$" – теорию возмущ. можно применять к каждому терму.
2. „$H_I \sim H_{ls}$" – к $H_I + H_{ls}$ – задача не решается, ибо „терм" нет.
3. „$H_I \ll H_{ls}$" –

1. Рассель-Сундеровское прибл. – прибл. LS-связи. (z ≤ 40)
2. —||—
3. прибл. jj-связи

Мы будем работать только в прибл. LS-связи.

$$A=\langle LSM_L'M_S'|H_{LS}|LSM_LM_S\rangle = \underset{\text{константа, но зависит от } L \text{ и } S.}{C(L,S)}\langle LSM_L'M_S'|\overbrace{\vec{L}\vec{S}}^{H_{eff}}|LSM_LM_S\rangle$$

$[\vec{l},A]=0 \Rightarrow \langle l'm'|A|lm\rangle = \underline{\delta_{ll'}}\delta_{mm'}\,a(l)$ (A – скал. оператор)

$[l_i,A]=0$

$$[l_i,B_j]=i\varepsilon_{ijk}B_k \Rightarrow \langle lm'|B_i|lm\rangle = \underbrace{\frac{\langle lm''|\vec{l}\vec{B}|lm''\rangle}{l(l+1)}}_{const\ C(l)}\underset{\sim\sim}{\langle lm'|l_i|lm\rangle}$$

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1 \xrightarrow{\text{у нас}} \sum_{\substack{LS\\ M_LM_S}} \underset{\text{наш базис.}}{|LSM_LM_S\rangle}\langle LSM_LM_S| \equiv 1.$$

Лекция 8

7 октября

в пределах терма

$$A=\sum_k \langle \underline{LS}M_L'M_S'|g(r_k)\vec{l}_k\vec{s}_k|\underline{LS}M_LM_S\rangle = \sum_{\substack{L''S''\\M_L''M_S''}}\sum_k \underbrace{\langle LSM_L'M_S'|g(r_k)\vec{l}_k|L''S''M_L''M_S''\rangle}_{\sim\delta_{SS''}}\underbrace{\langle L''S''M_L''M_S''|\vec{s}_k|LSM_LM_S\rangle}_{\sim\delta_{LL''}} ⊜$$

$[\vec{L}_\Sigma,\vec{s}_k]=0 \Rightarrow \vec{s}_k$ относ. сум. орбит. момента – скаляр.

(т.к. L_Σ и $\vec{s}_k$ совсем разные) $[L_\Sigma, S_k^{(b)}]=0$

$[\vec{S}_k, g(r_k)\vec{l}_k]=0$

$$⊜ \sum_{(M_L'',M_S'')}\sum_{(k)}\langle LSM_L'M_S'|g(r_k)\vec{l}_k|LSM_L''M_S''\rangle\langle \underline{LS}M_L''M_S''|\vec{s}_k|\underline{LS}M_LM_S\rangle ⊜$$

$$[\overset{\text{сум. спин}}{S_a}, S_b^{(k)}] = [S_a^{(1)}+S_a^{(2)}+\ldots+S_a^{(n)}, S_b^{(k)}] = \left|S_a^{(1)} \text{ и } S_b^{(k)} \text{ коммут. и пр.}\right| = [S_a^{(k)},S_b^{(k)}] = i\varepsilon_{abc}S_c^{(k)}$$

$\Rightarrow \vec{s}^{(k)}$ относ. сум. спина – векторный оператор

$[L_a, g(r_k)\vec{l}_k] \Rightarrow$ векторной опер-р $g(r_k)\vec{l}_k$ $\left([L_a, g(r_k)l_b^{(k)}]=i\varepsilon_{abc}\,g(r_k)l_c^{(k)}\right)$

$$\circleddash \sum_{M_L'', M_S''} \sum_{k} \langle LSM_L' M_S' | \vec{L} | LSM_L'' M_S'' \rangle C''(L) \cdot C'(S)$$

$$\langle LSM_L'' M_S'' | \vec{S} | LSM_L M_S \rangle = \left| \sum_k C''(L) \cdot C'(S) \equiv C \right| =$$

$$= \sum_{M_L'', M_S''} C \langle LSM_L' M_S' | \vec{L} | LSM_L'' M_S'' \rangle \langle LSM_L'' M_S'' | \vec{S} | LSM_L M$$

$\circleddash$ $[\vec{S}_a, L_b] = 0 \Rightarrow$ допис. 0

$[L_a, S_b] = 0 \Rightarrow$ допис 0

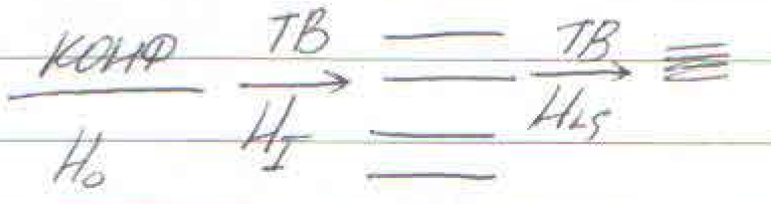
$$\circleddash \sum_{\substack{M_L'' M_S'' \\ L'' S''}} C \langle LSM_L' M_S' | \vec{L} | L'' S'' M_L'' M_S'' \rangle \langle L'' S'' M_L'' M_S'' | \vec{S} | LSM_L M_S \rangle = C \langle LSM_L' M_S' | \vec{L}\vec{S} | LSM_L M_S \rangle$$

что и требовалось док-т

$$\boxed{\langle LSM_L' M_S' | H_{LS} | LSM_L M_S \rangle \equiv \underset{+\text{конф}}{C(L,S)} \langle LSM_L' M_S' | \vec{L}\vec{S} | LSM_L M_S \rangle}$$

$$\Rightarrow H_{LS} = C\vec{L}\vec{S} = \frac{C}{2}\left(\underbrace{(\vec{L}+\vec{S})}_{\vec{J}}{}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2 \right)$$

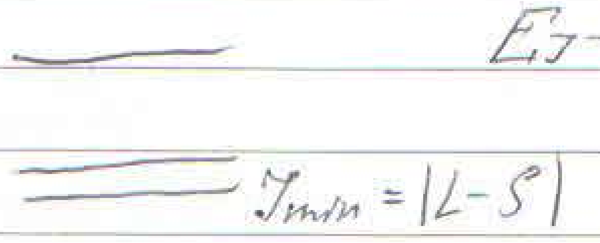
$$|LSM_L M_S\rangle \rightarrow |LSJM_J\rangle$$



Считаем матр. элементы.

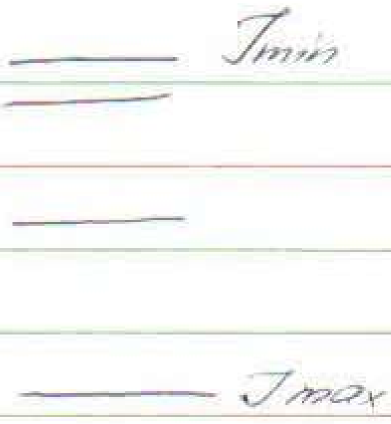
$$\langle LSJ' M_J' | \frac{C}{2}(J^2 - L^2 - S^2) | LSJM_J \rangle = \frac{C}{2}\big(J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\big) \delta_{J'J} \delta_{M_J' M_J}$$

$C > 0$



$E_J - E_{J-1} = C \cdot J$ (правило инт. Ланде)

$C<0$



С опред. III правилом Хунда:

<u>III ПРАВИЛО ХУНДА</u>: Если в конф. nl^k $k \leq 2l+1$, то $C>0$, $\overset{J_{max}}{\underset{J_{min}}{\equiv}}$ а если $k \geq 2l+1$ $C<0$ $\overset{J_{min}}{\underset{J_{max}}{\equiv}}$

<u>ТЕОРЕМА</u>: Для терма вып. I и II ПХ (т.е. $\exists L_{max}$ и S_{max}) $\Rightarrow$ вып. III ПХ.

<u>Док-во</u>: $H_{LS} = \sum_a g(r_a)\vec{l_a}\vec{s_a}$

$H_{eff} = C\vec{L}\vec{S}$

$\Rightarrow$ матр. эл. по ст. вектору $|\psi\rangle = |L\, S\, M_L = L\; M_S = S\rangle$:

$$\langle\psi|H_{eff}|\psi\rangle = \langle\psi|C L_z S_z + \frac{C}{2}L_+ S_- + \frac{C}{2}L_- S_+|\psi\rangle =$$

$$= C\cdot L\cdot S\underbrace{+0+0}_{\text{т.к. ст. вектор}}$$

(или в общ. случае: сдвиг от диагонали, а мы считаем диагональ).

$$\langle\psi|H_{LS}|\psi\rangle = \langle\psi|\sum_a g(r_a)\vec{l_a}\vec{s_a}|\psi\rangle$$

$$\langle\psi|H_{LS}|\psi\rangle = \langle\psi|\sum g(r_a)\left(l_z^{(a)}s_z^{(a)} + \frac{1}{2}\underset{0}{\underbrace{l_+^{(a)}s_-^{(a)}}} + \frac{1}{2}\underset{0}{\underbrace{l_-^{(a)}s_+^{(a)}}}\right)|\psi\rangle =$$

$$= \sum_a \langle\psi|g(r_a)(l_z^{(a)}s_z^{(a)})|\psi\rangle \ominus$$

а) $k \leq 2l+1$ $\begin{pmatrix} l & l-1 & \ldots & l-k+1 \\ \uparrow & \uparrow\uparrow & \ldots & \uparrow \end{pmatrix} \Rightarrow \sum_{a=1}^{k}(l-a+1) = L > 0$

Если $k = 2l+1$, то $\sum_{a=1}^{k}(l-a+1) = 0 \Rightarrow$ |НЕТ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ|

Учтем радиальные ф-ии, они эквивалентны $\Rightarrow$ $g(r_a) \rightarrow \langle g\rangle$

$$\ominus\ \frac{1}{2}\langle g\rangle L = CLS \Rightarrow C>0.$$

б) $k \geq 2l+1$ $\begin{pmatrix} \underbrace{\begin{matrix} l & l-1 & & -l \\ \uparrow & \uparrow & \ldots & \uparrow \end{matrix}}_{2l+1} & \underbrace{\begin{matrix} l & l-1 & \ldots & l-k'+1 \\ \downarrow & \downarrow\downarrow\downarrow & \ldots & \downarrow \end{matrix}}_{k' = k-2l-1} \end{pmatrix} \Rightarrow \sum_{a=1}^{k'}(l-a+1) = -L < 0$

$$\ominus \langle g\rangle\left(\left(-\frac{1}{2}\right)l-\frac{1}{2}(l-1)-\frac{1}{2}(l-2)-\ldots-\frac{1}{2}(l-k'+1)\right)=$$

$$=-\frac{1}{2}\langle g\rangle L = CLS \Rightarrow C<0.$$

Атом в полях

Магнитное и эл-кие : H_z и E_z

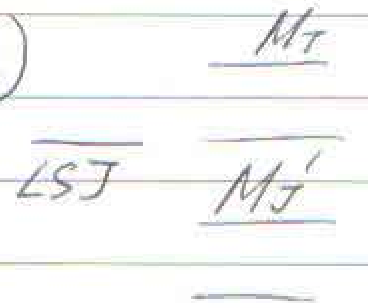
I МАГНИТНОЕ ПОЛЕ H_z

$\underbrace{\mathcal{H}_0 \gg \mathcal{H}_I}_{ПЦП}, \underbrace{\gg \mathcal{H}_{LS}}_{LS}$, а какое место у H_z?

а) СЛАБОЕ ПОЛЕ (НОРМ. ЗЕЕМАН) : $\mathcal{H}_{LS} \gg \mathcal{H}_{H_z}$
(тонкая структура не разрушается)

б) СИЛЬНОЕ ПОЛЕ (АНОМАЛЬНЫЙ ЗЕЕМАН): $\mathcal{H}_I \gg \mathcal{H}_{H_z} \gg \mathcal{H}_{LS}$
(сначала необх. учесть H_z, а потом тонкую структуру)

К а)



$2J+1$ вырожд.

$$\langle LSJM_J'|\mathcal{H}_{H_z}|LSJM_J\rangle \ominus$$

$$\mathcal{H}_{H_z}=\sum_k\left(-2\mu_0\vec{s}_k\vec{H}-\mu_0\vec{l}_k\vec{H}\right)=-2\mu_0\vec{S}\vec{H}-\mu_0\vec{L}\vec{H}=$$

$$=-2\mu_0 S_zH_z-\mu_0L_zH_z.=-\mu_0S_zH_z-\mu_0J_zH_z$$

$$\ominus\langle LSJM_J'|-\mu_0S_zH_z-\mu_0J_zH_z|LSJM_J\rangle=$$

$$=-\mu_0H_z\cdot M_J\delta_{M_JM_J'}-\mu_0H_z\frac{1}{J(J+1)}\langle LSJM_J''|\vec{S}\vec{J}|LSJM_J''\rangle\cdot$$

$$\cdot\langle LSJM_J|J_z|LSJM_J'\rangle\ominus$$

(Учим, что S_z - вект. оператор относ. J)

Если $J=0$, то $\langle\psi|J_z|\psi'\rangle=0$, $\langle\psi''|\vec{S}\vec{J}|\psi''\rangle=0$, т.е. вообще никакого эффекта не будет.

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

$$\ominus-\mu_0H_zM_J\delta_{M_JM_J'}-\frac{\mu_0H_z}{2J(J+1)}M_J\delta_{M_JM_J'}\left(J(J+1)+S(S+1)-L(L+1)\right)$$

$$=-\mu_0H_zM_J\left[1+\frac{J(J+1)+S(S+1)-L(L+1)}{2J(J+1)}\right]\delta_{M_JM_J'}$$

Фактор Ланде $g = -\mu_0 H_z M_J \left[1 + \frac{J(J+1)+S(S+1)-L(L+1)}{2J(J+1)} \right]$

$\Rightarrow$ расщепляется на $2J+1$ (уровни не вырождены)

II ЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ ПОЛЕ E_z

Утв, которые понадобятся:

1) $\sum\limits_{m=-l}^{l} |lm\rangle\langle lm| = \hat{A}$ — скал. оператор, относ. l в пределах l, $\hat{A}$ - ед. оператор.

Лекция 9 10 октября

2) Тензор II ранга $[l_a, F_{bc}] = i\varepsilon_{abd} F_{dc} + i\varepsilon_{acd} F_{bd}$

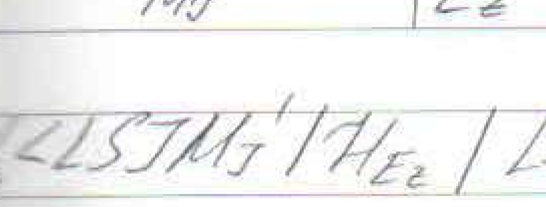
$\underbrace{B_b}_{\text{момент 1}} \cdot \underbrace{B_c}_{\text{момент 1}} = F_{bc}$) возм. 0, 1, 2.

def: $\langle lm'|F_{bc}|lm\rangle = \langle lm'| c_1\delta_{bc} + c_2(l_b l_c - l_c l_b) + c_3(l_b l_c + l_c l_b - \frac{2}{3} l^2 \delta_{bc}) |lm\rangle$

$$\langle lm'|F_{33}|lm\rangle = \Big(\overbrace{c_1 + c_2 \cdot 0 + c_3(2m^2 - \tfrac{2}{3}(l+1)l}^{c_1'})\Big)\delta_{mm'}$$

$$\langle lm'|F_{33}|lm\rangle = [c_1' + 2m^2 c_3]\,\delta_{mm'}$$

Решаем задачу



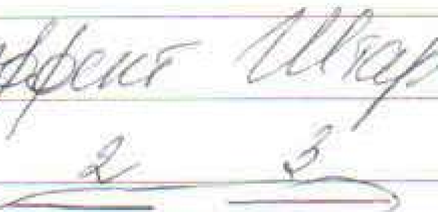
$\langle LSJM_J'|H_{E_z}|LSJM_J\rangle$; $H_{E_z} = \sum\limits_{k=1}^{N}(-eE_z \cdot z_k) = -E_z \cdot \underbrace{D_z}_{\text{дип. момент атома}}$

$\vec{D}$ - вектор, относ $\vec{L}$, относ. $\vec{J}$ (z-комп. $\vec{D}$)

$\langle LSJM_J'|-E_z D_z|LSJM_J'\rangle = 0$, т.к. $\exists$ правила отбора $\left(\langle l'm'|z|lm\rangle \neq 0 \text{ при } \begin{cases} m'=m \\ l'=l\pm1 \end{cases}\right)$

$L \neq L \pm 1 \Rightarrow \boxed{0}$.

В водороде эффект Штарка линеен, а в многоэл. атоме - нет



(в многоэл. атоме линейность запр. правилом Хунда)

2ой этап:

$$E_n^{(2)} = \sum_{m\neq n} \frac{|\langle \psi_m^{(0)} | \mathcal{H}_I | \psi_n^{(0)}\rangle|^2}{\underset{\text{конф 1, } L, S, J}{E_n^{(0)}} - \underset{\text{конф. 2, } L', S', J'}{E_m^{(0)}}} = \langle \psi_n^{(0)} | \mathcal{H}_I \sum_m \frac{\overset{\text{вообще } L'S'J'M_J'}{|\psi_m^{(0)}\rangle\langle\psi_m^{(0)}|}}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}} *$$

вообще $LSJM_J$

$$* \mathcal{H}_I|\psi_n^{(0)}\rangle = \langle LSJM_J|(-E_z)D_z \sum_{\substack{L'S'J' \\ \text{конф}'}} \frac{1}{E_{LSJ}-E_{L'S'J'}} *$$

$$* \underbrace{\sum_{M_J'} |L'S'J'M_J'\rangle\langle L'S'J'M_J'|}_{B} * (-E_z)D_z |LSJM_J\rangle \textcircled{=}$$

D_z — третья комп. вектора $\vec{D}$, явл. вект. относ. $\vec{J}$.

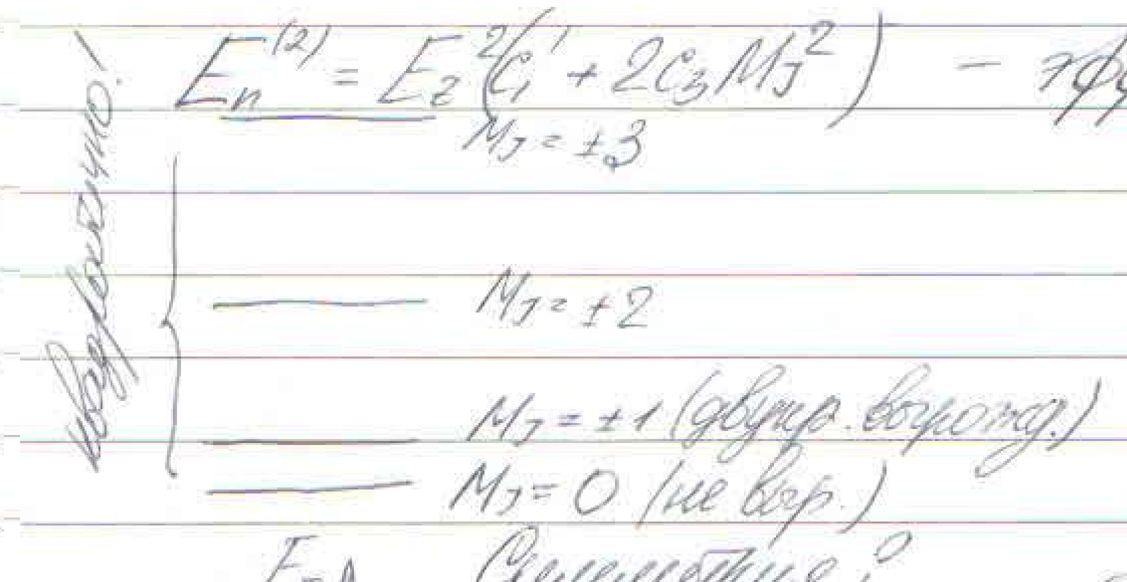
B — скаляр относ. J

$$\underbrace{D_z \cdot B \cdot D_z}_{F_{33} = F_{zz}}$$

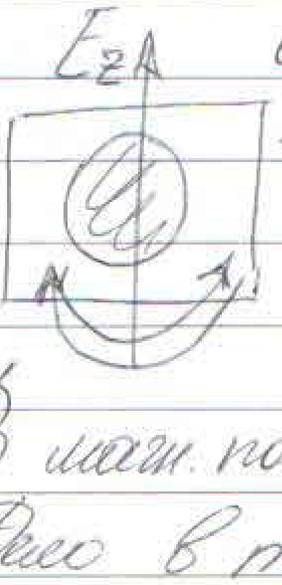
$$\textcircled{=}\ E_z^2(C_1' + 2C_3M_J^2)$$

Надувательство: Если в 1ом пор-ке ТВ 0 для выр. уровня, то во 2ом пор-ке надо считать матрицу с M_J', получится $\delta_{M_J M_J}$ (в общем случае матрица недиагональна).

$$\underline{E_n^{(2)} = E_z}^2(C_1' + 2c_3M_J^2)$$ — эффект Штарка.



Симметрия?



← отражение в этой плоскости

(это симметрия из-за вырожд.)

В магн. поле $E_n = -\mu_0 g M_J H_z$, вырожд. нет.

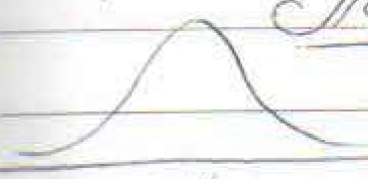
Дело в том, что E — прав. поле, а H — аксиальное,

$\vec{H} = \mathrm{rot}\,\vec{A} \Rightarrow H_z \to -H_z$ (при отраж. плоскости)

$E_z \to +E_z$

Упругое потенциальное рассеяние

Пост. задачи рассеяния



$\underbrace{e^{ikx}}_{} + \underbrace{Ae^{-ikx}}_{} \quad \underbrace{Be^{ikx}}_{}$ (+ норм-ка на δ-ф-ю)

ток е-ти д. волны

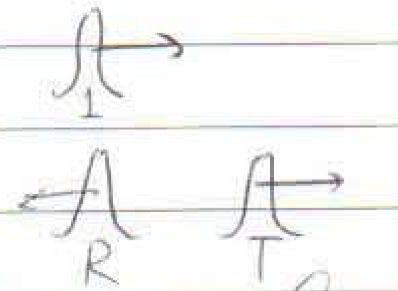
поток вер-ти прош. волны

поток вер-ти отраж. волны

$R = |A|^2$

$T = |B|^2 \quad R + T = 1$

У этого нет физ. смысла, это помогает строить гауссовы пакета:

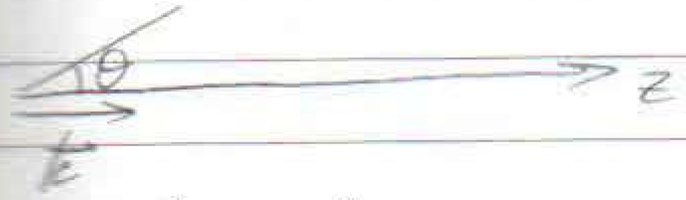


Что в 3х-мерии? Хотим вот такую асимпт.:

$$\circledast \quad \psi(\vec{x})\Big|_{|\vec{x}| \to \infty} = \underbrace{e^{i\vec{k}\vec{x}}}_{\substack{\text{налет.}\\ \text{пл. волна}\\ \text{(во всем пр-ве)}}} + \underbrace{\frac{e^{i|\vec{k}||\vec{x}|}}{|x|} \cdot f(\theta, \varphi)}_{\text{расх. сфер. волна с ампл.}}$$
- усл. на асимптотику.

$f(\theta, \varphi)$ - „ампл. рассеяния“.

(θ и φ от оси, сонапр. с $\vec{k}$)

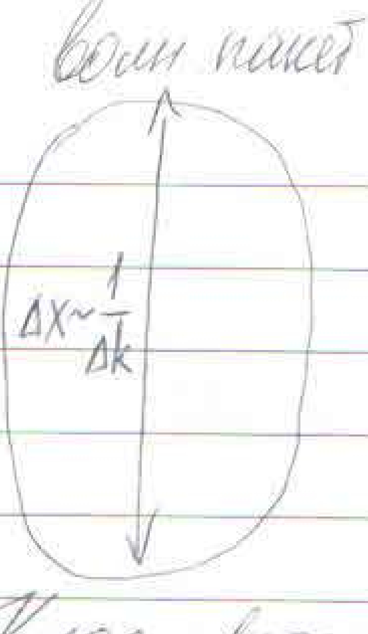


Т) если $\int d^3\vec{x}\, V^2(\vec{x}) < \infty$, то асимпт. ⊛ можно получить и задача рассеяния ставится (для кулона неверно).

Диф. сечение рассеяния - поток вер-ти в телесной угол $d\Theta$ к единичному налет. потоку

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \varphi)|^2$$

Замечание: ∃ 3 способа нормировки (возм. $\frac{e^{ikx}}{2\pi}, \frac{e^{ikx}}{|k|}$, где получается именное множитель), мы выбрали одну из трёх и будем работать в ней.



возможные ответы $4\pi a^2$, $2\pi a^2$

$k \to \infty \Rightarrow 2\pi a^2$.

В любом случае пакет может зацепить пот-л

Клас. предел квант. мех.: 1) $\Delta k \to \infty$
(πa^2)
2) размер пакета $\ll$ хар-ный размер рассея. центра $\Rightarrow$ как мат. точку.

Ур-е Липпмана-Швингера

$$\boxed{\psi(\bar{x}) = e^{ik\bar{x}} + \int d\bar{y}^3 G_0(\bar{x},\bar{y}) \frac{2m}{\hbar^2} V(\bar{y}) \psi(\bar{y})}$$

где $G_0(\bar{x},\bar{y}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{\exp[i|k||\bar{x}-\bar{y}|]}{|\bar{x}-\bar{y}|}$ — ф-я Грина для ур. Гельмгольца, опис. когер. излучение точечн. источника: $(\underset{\substack{\bar{x} \\ \text{или} \\ \bar{y}}}{\Delta} + k^2) G_0 = \delta(\bar{x}-\bar{y})$,

$\psi(\bar{x})$ — соотв. нор-ке на δ-ф-ю.

Ур-е ЛШ имеет след. св-ва:

1. явл. реш. СУШ
2. имеет прав. асимпт. при $|\bar{x}| \to \infty$

Док-во:

1. Применим $\Delta + k^2$ к УЛШ:

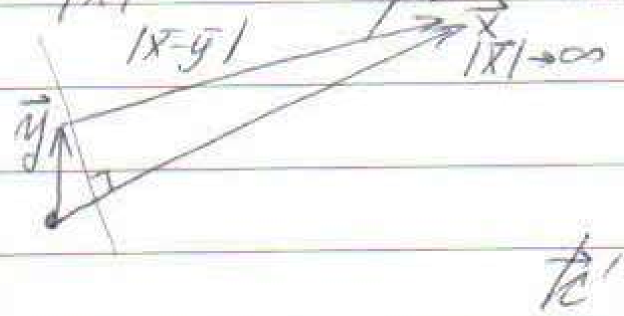
$$(\Delta+k^2)\psi(\bar{x}) = (\Delta+k^2) e^{ik\bar{x}} + \int d\bar{y}\, \delta(\bar{x}-\bar{y}) \frac{2m}{\hbar^2} V(\bar{y}) \psi(\bar{y})$$

$$(\Delta+k^2)\psi(\bar{x}) = \quad 0 \quad + \frac{2m}{\hbar^2} V(\bar{x}) \psi(\bar{x})$$

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \Rightarrow \Delta\psi(\bar{x}) = \frac{2m}{\hbar^2}(V(\bar{x}) - E)\psi(\bar{x}) \text{ — СУШ.}$$

2. $\psi(\bar{x})\Big|_{|\bar{x}| \to \infty} = e^{ik\bar{x}} + $ „нечто“

Что с этим „нечто“? $V(\bar{y})$ на самом деле убывает $\Rightarrow \exists$ хар-ный размер a (a) $\Rightarrow$ интеграл при $|\bar{x}| \to \infty$ ограничен, а $\bar{y}$ – конечен.



$$|\bar{x}-\bar{y}| \cong |\bar{x}| - (\bar{y}\bar{x})/|\bar{x}| + \ldots$$

$\vec{k}' = |\vec{k}| \cdot \frac{\vec{x}}{|\bar{x}|}$ – обозначение (– волн. число рассеяных частиц)

$$|\vec{k}||\bar{x}-\bar{y}| = |\vec{k}||\bar{x}| - (\vec{k}' \cdot \vec{y})$$

$$G_0(\bar{x},\bar{y})\Big|_{|\bar{x}|\to\infty} = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{i|\vec{k}||\bar{x}| - i\bar{k}'\bar{y}}}{|\bar{x}| - \cancel{(\bar{y}\bar{x})/|\bar{x}|}}$$

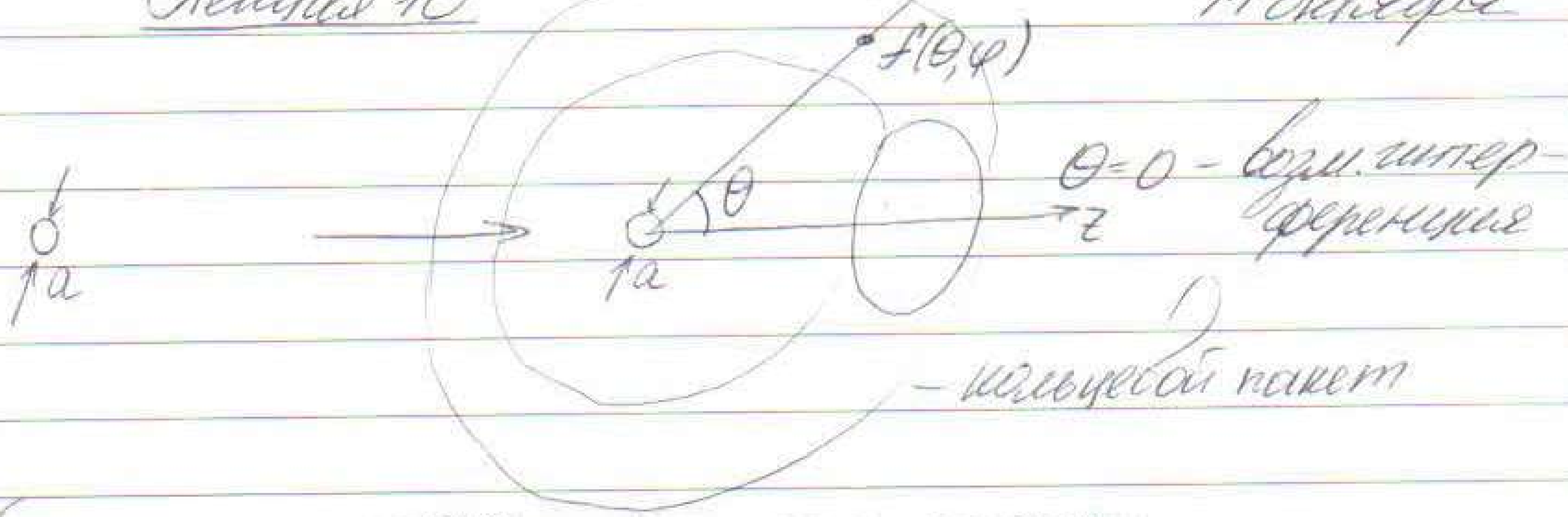
$$\psi(\bar{x})\Big|_{|\bar{x}|\to\infty} = e^{i\bar{k}\bar{x}} + \frac{e^{i|\vec{k}||\bar{x}|}}{|\bar{x}|}\left[-\frac{1}{4\pi}\int d^3\bar{y}\, e^{-i\bar{k}'\bar{y}}\frac{2m}{\hbar^2}V(\bar{y})\psi(\bar{y})\right]$$

что и требовалось док-ть.

$f(\theta,\varphi) = [\;\cdot\cdot\;]$ – ампл. рассеяния

Лекция 10

14 октября



Приближенные методы решения задачи рассеяния

① Борновский ряд

$$\psi(\bar{x}) = e^{i\bar{k}\bar{x}} + \int d^3\bar{y}\, G_0(\bar{x},\bar{y})\frac{2m}{\hbar^2}V(\bar{y})\cdot\psi(\bar{y})$$

Самый изв. метод реш. инт. ур-я – итерационный метод

$$\psi(\bar{y}) = e^{i\bar{k}\bar{y}} + \int d^3\bar{z}\, G_0(\bar{y},\bar{z})\frac{2m}{\hbar^3}V(\bar{z})\psi(\bar{z}) \leftarrow$$

$$\psi(\bar{z}) = e^{i\bar{k}\bar{z}} + \int d^3\bar{w}\, G_0(\bar{z},\bar{w})\frac{2m}{\hbar^2}V(\bar{w})\cdot\psi(\bar{w})$$

....

и т.д.

В рез-те: Борновский ряд (после бескон. числа подстановок
Мы будем работать в 1ом Борновском приближении,
т.е. будем интересоваться членами разложения до:

$$\psi(\bar{x}) = e^{i|k||x|} + \int d^3\bar{y}\, G_0(\bar{x},\bar{y}) \frac{2m}{\hbar^2} V(\bar{y}) e^{i|k||\bar{y}|} + \ldots$$

Усл. сх-ти Борн. ряда:

$\boxed{I}$ Для сфер. сим. пот. БР сходится, если $\int_0^\infty \underset{\text{именно } r^1}{r}\, dr\, |V(r)| < \infty$

Усл. применимости 1БП (1 борн. прибл.):

$$\Big|\int d^3\bar{y}\, \underset{\downarrow}{G_0(\bar{x},\bar{y})} \frac{2m}{\hbar^2} \underset{\downarrow}{V(\bar{y})} \underset{\substack{\downarrow \\ 1 \text{ (амплитуда)}}}{e^{i|k||\bar{y}|}} \Big| \ll 1$$

V_0 – хар-ная величина потенциала

Пот. Юкавы $g\frac{e^{-\mu r}}{r}$, $a \sim \frac{1}{\mu}$ – хар-ная обл., где он отличен от 0 $\Rightarrow g\frac{e^{-1}}{1/\mu} = \frac{g\mu}{e} = V_0$

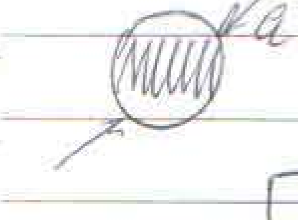
$$\frac{1}{|\bar{x}-\bar{y}|} e^{i|k||\bar{x}-\bar{y}|} = 1/a$$

$$\Big|\int d^3\bar{y}\, \frac{1}{a} \cdot \frac{2m}{\hbar^2} V_0 \cdot 1 \Big| \simeq a^3 \cdot \frac{1}{a} \frac{2m}{\hbar^2} V_0 \simeq a^2 V_0 \frac{2m}{\hbar^2}$$

$\boxed{|V_0| \ll \frac{\hbar^2}{ma^2}}$ – усл. (1ое из возможных) для примен-я 1БП.

! Не важна кин. энергия налет. частиц.

Оценку можно ослабить, когда подынтегр. ф-я быстро осциллирует ($ka \gg 1$).



$$\Big|\int d^3\bar{y}\, \frac{1}{a} \cdot \frac{2m}{\hbar^2} V_0 e^{ikz} \Big| \cong a^2 \Big(\int_0^a dz\, \frac{2m}{\hbar^2} \frac{V_0}{a} e^{ikz}\Big) \simeq \frac{2m}{\hbar^2} V_0 \frac{a^2}{a} \frac{e^{ik}}{k}$$

$\boxed{V_0 \ll \frac{\hbar^2}{ma^2} \cdot ka}$ (при $ka \gg 1$ это условие приоритетнее 1ого из полученных)

усл (2ое) для применимости 1БП

$$f(\theta,\varphi) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3\bar{x}\, e^{-ik'\bar{x}} \frac{2m}{\hbar^2} V(\bar{x}) \underset{e^{ik\bar{x}}}{\psi(\bar{x})}$$

$$\bar{k} - \bar{k}' = \bar{q}$$

$$\boxed{f(\theta,\varphi) = -\frac{1}{4\pi}\int d^3\bar{x}\, e^{i\bar{q}\bar{x}}\, \frac{2m}{\hbar^2} V(\bar{x})}$$ — ампл. рассеяния в 1БП („Фурье образ" потенц.)

$(\bar{q} = \bar{k} - \bar{k}')$

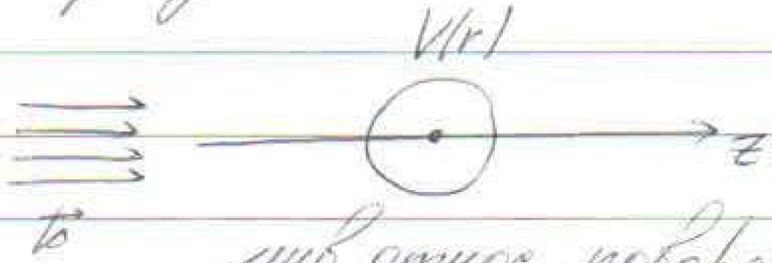
② Парциальное разложение (разложение по парц. волнам)

$V(\bar{x}) = V(|\bar{x}|) = V(r)$ — сферически симметр. потенциал

Сохр. l и E, l^2. Это позволяет по l все „картинки" разделить, а потом собрать.

$\sum\limits_{l=0}^{\infty}$ — парц. ряд

А что ет?



инв. относ. поворота вокруг z

$Y_{lm}(\theta,\varphi)$ $m \neq 0 \Rightarrow Y_{lm}(\varphi)$, а у нас нет зав-ти от m

$\Rightarrow m = 0$

$Y_{l0}(\theta,\varphi) \sim P_l(\cos\theta)$ ← полиномы Лежандра

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

$f(\theta) = \sum\limits_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta) \cdot f_l$ — парц. ряд для разложения ампл. рассеяния

какие-то коэф ($\mathbb{C}$) — парц. ампл. рассеяния — при разложении ампл. рас. по базису полин. Леж

$\psi(\bar{x}) = \sum\limits_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta) R_l(r)$ — парц. ряд для волн. функции, где

$R_l(r)$ — рад. часть решения, удовл. УШ для рад. части:

$$R''(r) + \frac{2}{r}R_l'(r) + \left(\frac{2m}{\hbar^2}E - \frac{2m}{\hbar^2}V - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) = 0$$

+ прав. асимптотика на ∞.

$e^{ikx} = \sum\limits_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta) R_l^{(0)}(r)$ — парц. ряд для пл. волны, где

$R_l^{(0)}(r)$ — рад. часть реш. (в отсутств. потенциала) УШ:

$$R_l^{(0)''}(r) + \frac{2}{r}R_l^{(0)'}(r) + \Big(\underset{\overset{\parallel}{\frac{2m}{\hbar^2}E}}{k^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\Big) R_l^{(0)}(r) = 0$$

$$\Delta R = \frac{w}{\sqrt{r}}$$

$$R_l^{(0)}(r) = \frac{1}{\sqrt{r}}\left[A\sqrt{\frac{\pi}{2k}}\, J_{l+1/2}(kr) + \cancel{B\sqrt{\frac{\pi}{2k}}\, \underset{\text{(особ. в 0)}}{N_{l+1/2}(kr)}}\right]$$

Шаровой Бессель: $j_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}}\, \underline{\underline{J_{l+1/2}(x)}}$

$J_\nu(x\to 0) \sim x^\nu \Rightarrow j_l(x\to 0) \sim x^l$

$J_\nu(x\to\infty) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi x}}\cos\left(x - \frac{\pi\nu}{2} - \frac{\pi}{4}\right) \Rightarrow j_l(x\to\infty) \sim \frac{1}{x}\cos\left(x - \frac{\pi(l+1)}{2}\right)$

$$e^{i\bar k\bar x} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta)\, \underset{\overset{\parallel}{i^l}}{A_l}\, j_l(kr)$$

(разл. по степеням l)

$$e^{i\bar k\bar x} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta)\, i^l j_l(kr)$$

Что с асимп. на ∞?

$$\psi(\bar x)\Big|_{|\bar x|\to\infty} = e^{i\bar k\bar x} + \frac{e^{ik|\bar x|}}{|\bar x|}\cdot f(\theta)$$

Приравн. коэф. при один. $(2l+1)P_l(\cos\theta)$:

$$R_l(r)\Big|_{r\to\infty} = i^l j_l(kr) + \frac{e^{ikr}}{r}\cdot f_l$$

$$\boxed{R_l(r)\Big|_{r\to\infty} = i^l \frac{1}{kr}\cos\left(kr - \frac{\pi(l+1)}{2}\right) + \frac{e^{ikr}}{r}\cdot f_l}$$

$\Rightarrow \underline{\underline{f_l}}$ - парц. ампл. рассеяния

$$R_l(r\to\infty) = i^l \frac{1}{2kr}\left(e^{ikr - \frac{i\pi}{2}(l+1)} + e^{-ikr + \frac{i\pi}{2}(l+1)}\right) + \frac{e^{ikr}}{r} f_l$$

$$e^{-i\frac{\pi}{2}(l+1)} = i^{-l} i^{-1}$$

$$R_l(r\to\infty) = \frac{1}{2kr} i^{-1} e^{ikr} + i^l \frac{1}{2kr} e^{-ikr + \frac{i\pi}{2}(l+1)} + \frac{e^{ikr}}{r} f_l \Rightarrow$$

$$R_l(r\to\infty) = \underset{\uparrow\ \text{расх. волна}}{\frac{e^{ikr}}{r}}\left(\frac{1}{2ik} + f_l\right) + \left(i^{2l+1}\cdot\frac{1}{2k}\right)\underset{\text{сход. волна}}{\frac{e^{-ikr}}{r}}$$

В прошлом семестре получили:

$\oint_\Gamma \vec j\, d\vec s = 0$ (для стац. ур. Шредингера) $\quad \boxed{\psi(\bar x)}_{\Gamma}$

Мы в кач-ве Γ возьмем сферу с $r = R$

$$\Rightarrow \left|\frac{1}{2ik} + f_l\right| = \left|i^{2l+1}\frac{1}{2k}\right|$$

$$\boxed{\left|f_l + \frac{1}{2ik}\right| = \frac{1}{2k}}$$

$\Rightarrow f_l + \frac{1}{2ik}$ - компл. число с $\frac{1}{2k}$ модулем и ∀ фазой — $\frac{1}{2k}e^{i\varphi}$

$$\boxed{f_l + \frac{1}{2ik} = \frac{1}{2k}\frac{1}{i}e^{2i\delta_l}}$$

Если $f_l = 0$, то рассеяния нет, а значит по ф-ле $\delta_l = 0$.
(поэтому добавл. множитель $\frac{1}{i}$)

Лекция 11

21 октября

$\delta_l + \pi n \to \delta_l$

$$f_l + \frac{1}{2ik} = \frac{1}{2k}\cdot\frac{1}{i}e^{2i\delta_l} \Rightarrow \boxed{f_l = \frac{1}{2ik}\left(e^{2i\delta_l} - 1\right)}$$

$$R_l(r\to\infty) = \frac{e^{ikr}}{r}\cdot\frac{1}{2k}\cdot\frac{1}{i}e^{2i\delta_l} + \frac{e^{-ikr}}{r}\cdot\frac{1}{2k}\cdot i^{2l+1} =$$

$$= \frac{e^{ikr}}{r}\frac{1}{2k}\frac{i^l}{i^{l+1}}e^{2i\delta_l} + \frac{e^{-ikr}}{r}\frac{1}{2k}\cdot i^{2l+1} =$$

$$= i^l e^{i\delta_l}\frac{1}{kr}\cdot\frac{1}{2}\left[e^{ikr+i\delta_l}\frac{1}{\underbrace{i^{l+1}}_{\text{из асимпт. бесселя}}} + e^{-ikr-i\delta_l}i^{l+1}\right] =$$

$$= i^l e^{i\delta_l}\frac{1}{2kr}\left[e^{ikr+i\delta_l-i\frac{\pi}{2}(l+1)} + e^{-ikr-i\delta_l+i\frac{\pi}{2}(l+1)}\right] \Rightarrow$$

$$R_l(r\to\infty) = i^l e^{i\delta_l}\frac{1}{kr}\cos\left(kr + \delta_l - \frac{\pi}{2}(l+1)\right)$$

Для своб. реш. плоской волны: $e^{ikx} \Leftrightarrow i^l\frac{1}{kr}\cos\left(kr - \frac{\pi(l+1)}{2}\right)$.
(при $\delta_l = 0 \to$)

Как найти δ_l?

$R_l = \frac{u_l}{r}$ $\quad u_l'' + \left(k^2 - \frac{2m}{\hbar^2}V(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)u_l = 0.$

$u_l(0) = 0$ $\quad kr \gg 1 \Leftrightarrow u_l'' + k^2 u_l = 0$ ($\leftarrow$ асимпт. при $r\to\infty$)

$$u_l(r\to\infty) = C\cos(kr + \varphi)$$

$$\boxed{\varphi = \delta_l - \frac{\pi}{2}(l+1)} \leftarrow$$ это не прибл.; это точный ответ.

$$f_l = \frac{1}{2ik}\left(e^{2i\delta_l} - 1\right) = \frac{e^{i\delta_l}}{2ik}\left(e^{i\delta_l} - e^{-i\delta_l}\right) = e^{i\delta_l}\frac{\sin\delta_l}{k}.$$

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

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = f^*(\theta)f(\theta) = \sum_{l,l'=0}^{\infty}(2l+1)(2l'+1)P_l(\cos\theta)P_{l'}(\cos\theta)\cdot f_{l'}^* f_l$$

=> диф. сечение рассеяния — не парц. ряд.

Для полн. сечения рассеяния парц. ряд получается:

$$\sigma_{tot} = \int d\Omega\, |f(\theta)|^2 = \left|\int d\varphi \sin\theta d\theta\, P_{l'}(\cos\theta) P_l(\cos\theta) = \right.$$

$$\left. = 2\pi \frac{2\delta_{ll'}}{2l+1}\right| = \sum_{l=0}^{\infty} \underbrace{4\pi(2l+1)|f_l|^2}_{} \ominus$$

парц. сечение рассеяния (3 вар-та =>)

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

Условие унитарности. Оптическая теорема.

$$f_l = \frac{e^{i\delta_l}}{k}\sin\delta_l \Rightarrow \boxed{\operatorname{Im} f_l = \frac{\sin^2\delta_l}{k} = k\cdot|f_l|^2}$$ — усл. унитарности для парц. ампл. рассеяния.

(это прямое следствие закона сохр. вер-ти)

Следствие отсюда — опт. теорема

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

$$= \sum_{l=0}^{\infty} 4\pi(2l+1)\frac{\operatorname{Im} f_l}{k} = \frac{4\pi}{k}\operatorname{Im}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)f_l = \frac{4\pi}{k}\operatorname{Im}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\cdot 1\cdot f_l$$

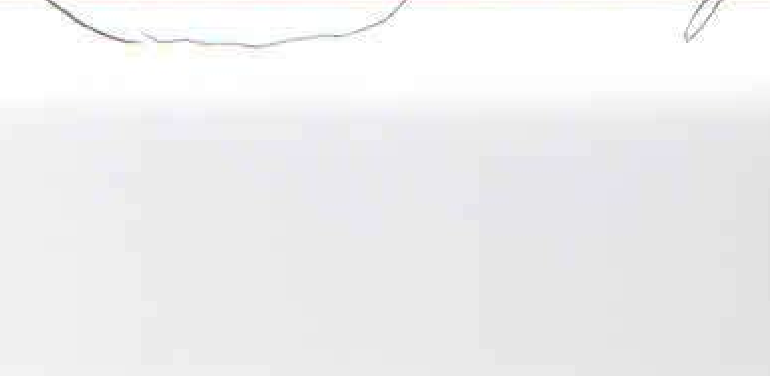
$$= \frac{4\pi}{k}\operatorname{Im}\sum_{l=0}^{\infty}P_l(1)(2l+1)f_l = \frac{4\pi}{k}\operatorname{Im}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos 0)f_l =$$

$$\begin{pmatrix} P_l(1) = 1 \\ P_l(-1) = (-1)^l \end{pmatrix} \qquad = \frac{4\pi}{k}\operatorname{Im} f(\theta=0)$$

$$\boxed{\sigma_{tot} = \frac{4\pi}{k}\operatorname{Im} f(\theta=0)}$$ — оптическая теорема (упр.

(у нас без док-ва)

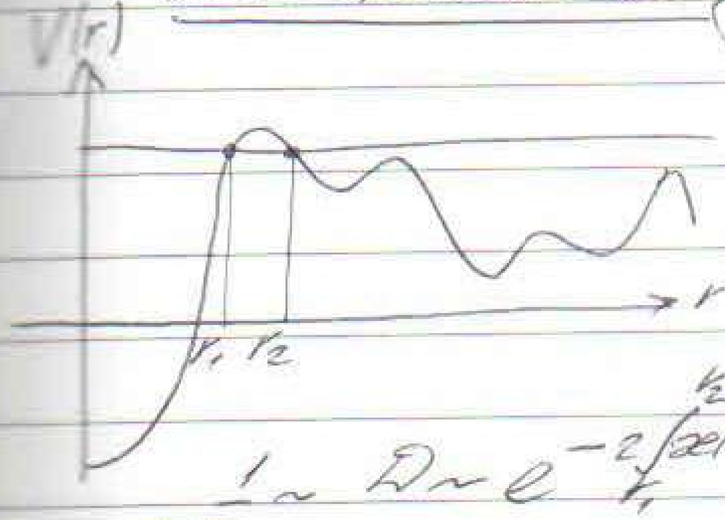
вып. и в сл. не сфер. симм. пот, но не в случае падения на центр.

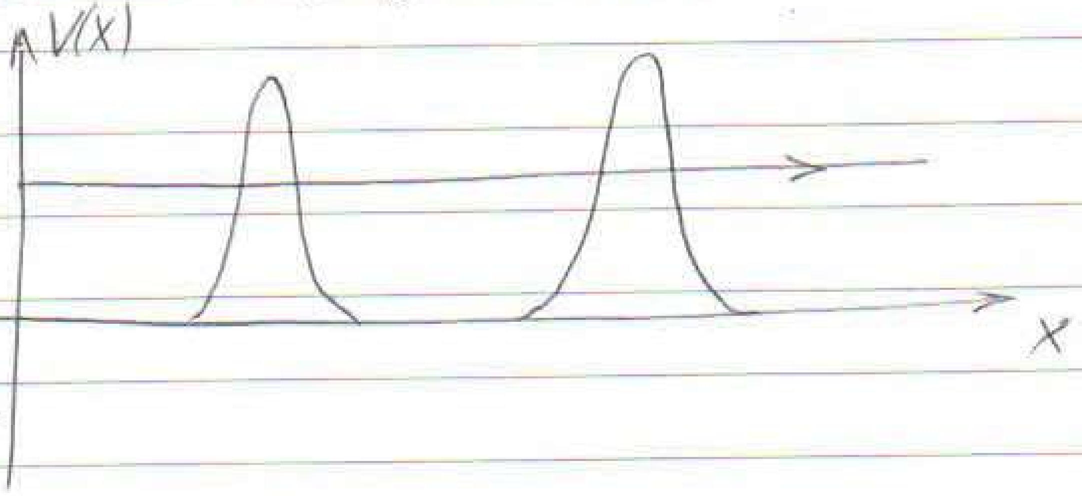


ВП, который не заметил потенциал

ампл. должна убыть ($\frac{4\pi}{k}\operatorname{Im}(f(\theta=0))$ вол. ампл. из налет. ВП)

Метастабильные уровни и резонансы.





$$\frac{1}{\tau} \sim D \sim e^{-2\int_{r_1}^{r_2} \varkappa(r)\,dr}$$

[illegible]

$$\tau = \tau(E), \text{ т.к. } \varkappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V(r) - E)}$$

Что является коэф. пропорциональности? Какое настоящее время жизни?

$$U_l'' + \left(k^2 - \frac{2m}{\hbar^2}V(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)U_l = 0$$

$\downarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ норм. на δ-ф-ю непр. спектр

$$U_l'' + \left(-\varkappa^2 - \frac{2m}{\hbar^2}V(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)U_l = 0$$

$\downarrow E = \frac{-\hbar^2\varkappa^2}{2m}$ норм. на 1 дискр. спектр

Мы ∠ $k^* = k_0 - ik_1$ + асимпт. $U_l(r\to\infty) = Ae^{ikr} + 0$ $(k_1 > 0)$

$$U_l(r\to\infty) = Ae^{ik_0 r}\cdot e^{k_1 r} + 0.$$

Решение с такой асимптотикой – метастаб. уровни.

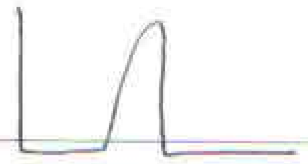
$$E = \frac{\hbar^2}{2m}(k_0^2 - k_1^2 - 2ik_0k_1)$$

Смысл есть, если $\underline{k_0 \gg k_1}$, поэтому $E = \frac{\hbar^2}{2m}(k_0^2 - 2ik_0k_1)$

При $k_1 < 0$ – попытка найти дискр. уровень с компл. энергией.

$$E = E_0 - iE_1 = E_0 - i\frac{\hbar}{2\boxed{\tau}} = E_0 - \frac{i}{2}\boxed{\Gamma}$$ — ширина резонанса

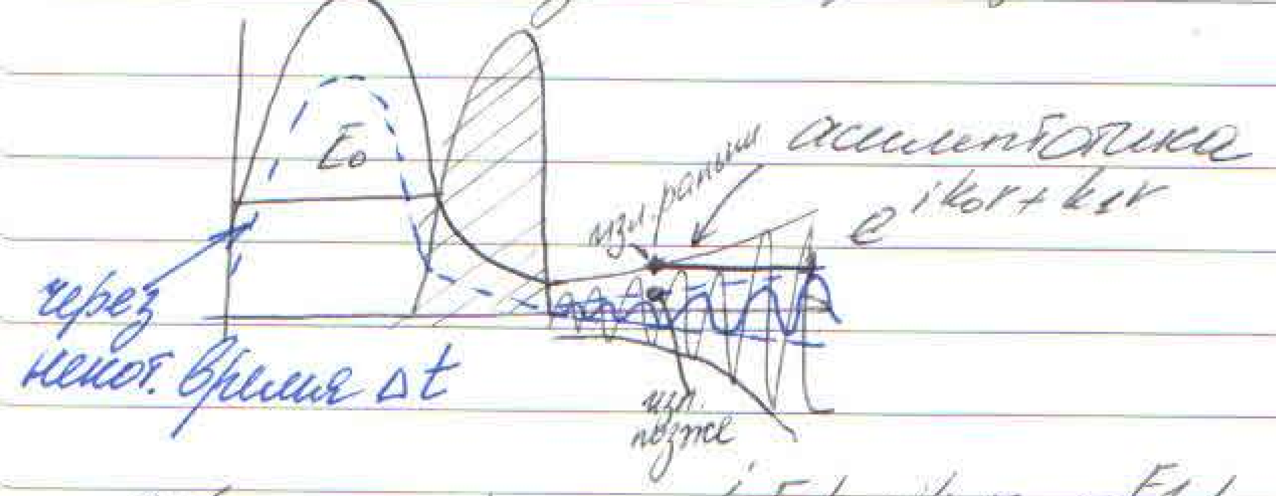
время жизни

Метастаб. уровни не только в потенц. вида  ; в этих случаях E_0 – дискр. уровни энергии лучшей ловушки 

$\psi(x) \downarrow E \longrightarrow \psi(x,t)=e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\cdot\psi(x)$ – стац. состояние

$$U_\ell(r,t)=e^{-\frac{i}{\hbar}Et}U_\ell(r)=e^{-\frac{i}{\hbar}E_0t}\cdot e^{-\frac{E_1t}{\hbar}}U_\ell(r)$$

Решение выглядит примерно так:



$$U_\ell(r\to\infty,t)=e^{-\frac{i}{\hbar}E_0t+ik_0r}e^{-\frac{E_1}{\hbar}t+k_1r}=e^{ik_0(r-v_\varphi t)}*$$

$*e^{k_1(r-v_{гр}t)}$, где $v_\varphi=\frac{1}{\hbar}\frac{E_0}{k_0}=\frac{1}{\hbar}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{k_0^2}{k_0}=\frac{\hbar k_0}{2m}$

$$v_{гр}=\frac{1}{\hbar}\frac{E_1}{k_1}=\frac{1}{\hbar}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{2k_1k_0}{k_1}=\frac{\hbar k_0}{m} \quad (v_{гр}=2v_\varphi)$$

⇒ огибающая двигается как целое с $v_{гр}$, а набивка двигается с $\frac{v_{гр}}{2}$

Физ. смысл: за Δt точки (•) излучались в разные времена.

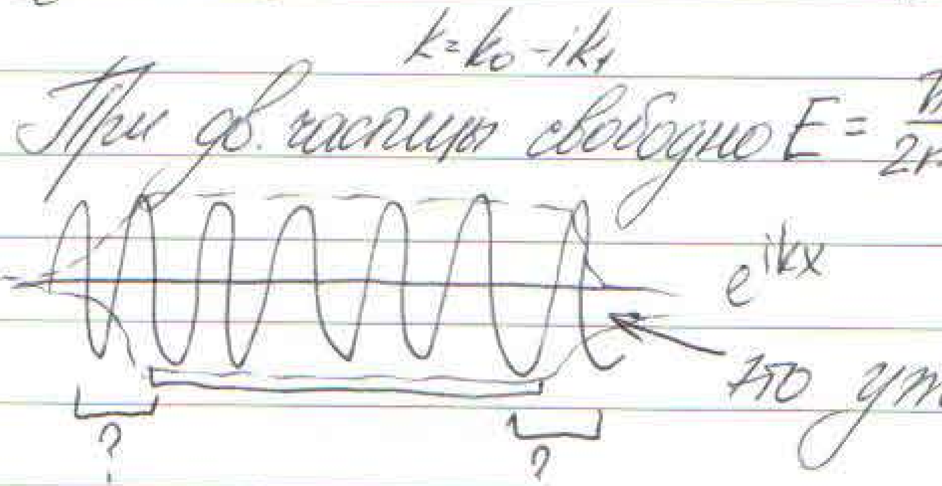
Лекция 12

24 октября

$U_\ell(r\to\infty)=Ce^{ikr}$ $\qquad U_\ell(r,t)=e^{-\frac{i}{\hbar}Et}U_\ell(r)$

$k=k_0-ik_1$ $\qquad E=E_0-iE_1$

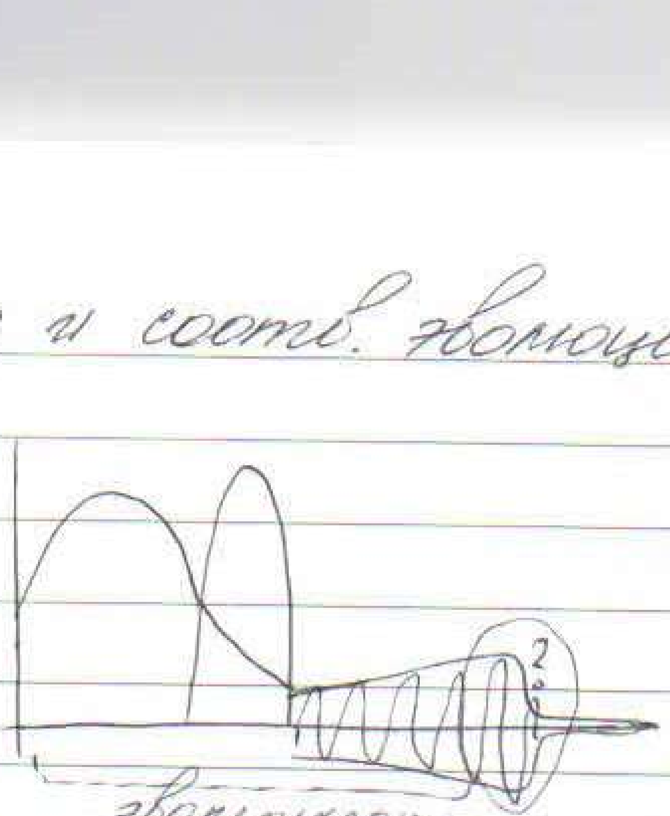
При св. частицы свободно $E=\frac{\hbar^2}{2m}k^2$



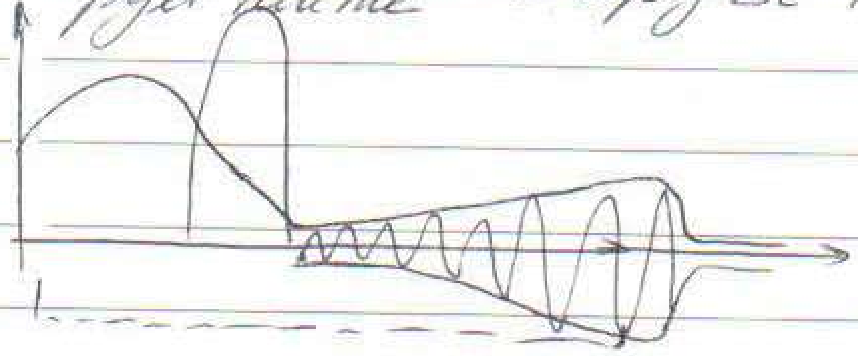
это уже сост., т.к. можно отнорм
на 1

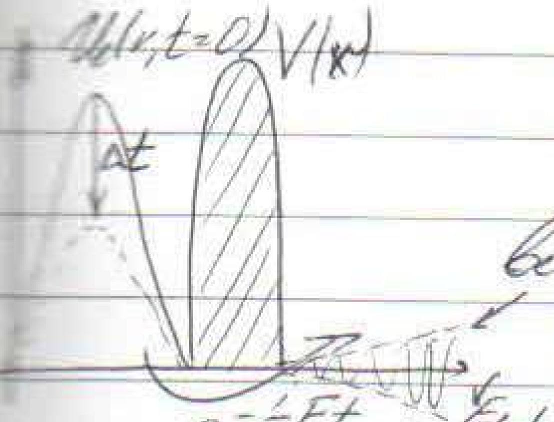
Внутри все ясно и соотв. эволюции $e^{-\frac{i}{\hbar}Et} e^{ikx}$

Можно обрезать:



эволюционирует так же => через Δt то же самое





волна уносит вер-ть
частица улетает на ∞

$$\underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t}}_{\text{унос вер-ти}} * \underbrace{e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar}t}}_{\text{убыв. амплитуды}}$$

k_0 – что-то вроде эн. сост

k_1 – время жизни

Что с резонансами?

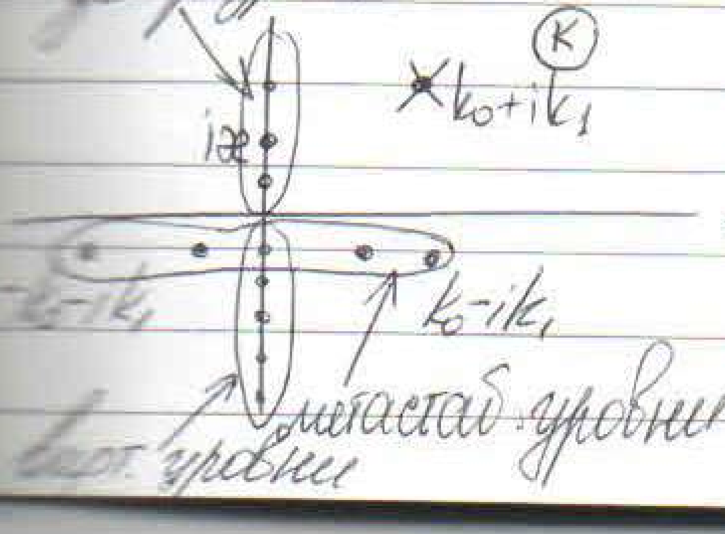
$$u_\ell'' + \left(k^2 - \frac{2m}{\hbar^2}V(r) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right)u_\ell = 0$$

на ∞: $u_\ell'' + k^2 u_\ell = 0 \Rightarrow u_\ell = Ae^{ikr} + Be^{-ikr}$

Метастаб. ур-ни – реш-я ур-я $B(k)=0$, лежащие в точке $k_0 - ik_1$

Второе решение можно получить отразив ур-е =>

дискр. ур-ни т. $-k_0 - ik_1$

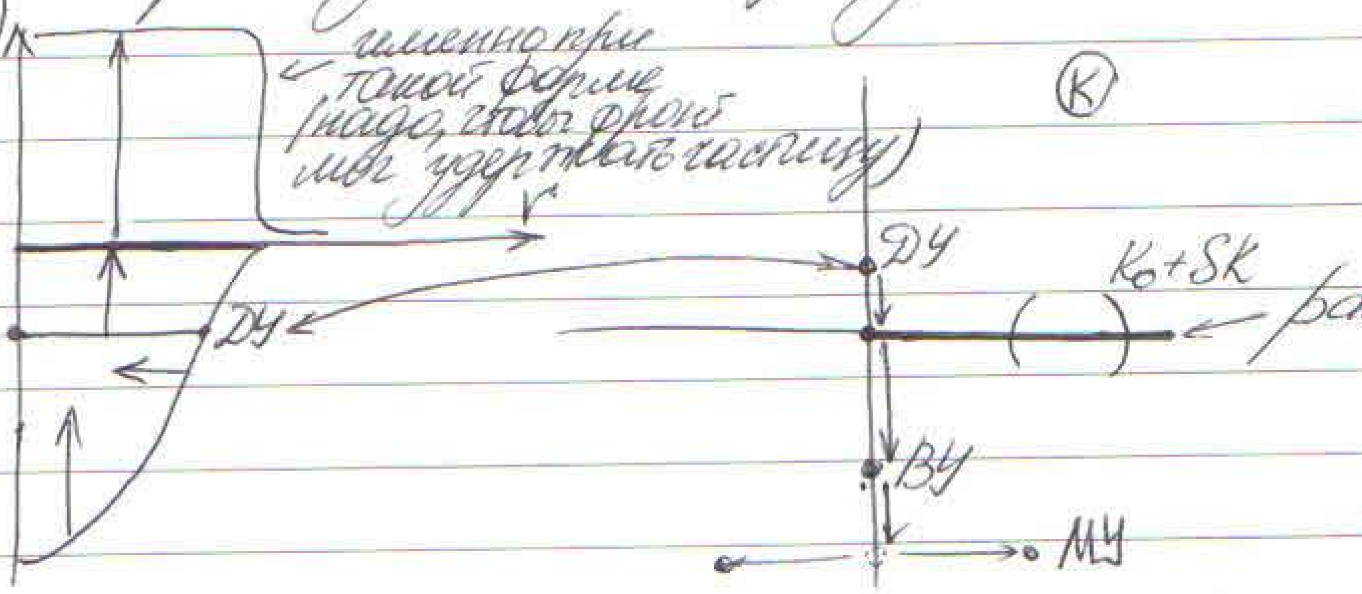


т. $i\varkappa \to Ae^{-\varkappa r}$ ← дискр. ур-ни эн.

← классификация решений ур-я $B(k)=0$.

т. $-i\varkappa \to Ae^{\varkappa r}$ ← вирт. ур-ни эн.

Что с реализацией вирт. ур-ней?



Ширина и глубина ямы — пар-ры функции $B(k)=0$.

$$k\in Re \quad C\cos\left(kr+\delta_l-\frac{\pi(l+1)}{2}\right)=\frac{C}{2}e^{ikr+i\delta_l-i\frac{\pi(l+1)}{2}}+\frac{C}{2}e^{-ikr-}$$
$$^{-i\delta_l+i\frac{\pi(l+1)}{2}}$$

В этом случае $\frac{C}{2}=\underbrace{A^*=B}_{\text{?если } k\in Re}$

$$B=\frac{C}{2}e^{-i\delta_l+i\frac{\pi(l+1)}{2}}$$

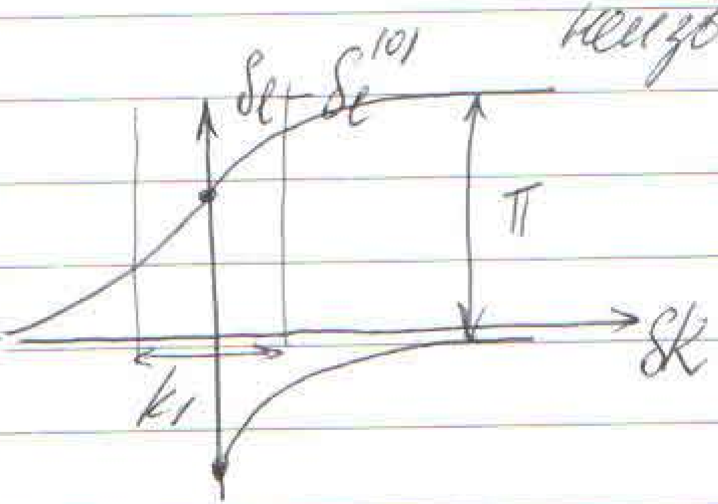
Какова фаза рас. δ_l в т. $k_0+\delta k$?

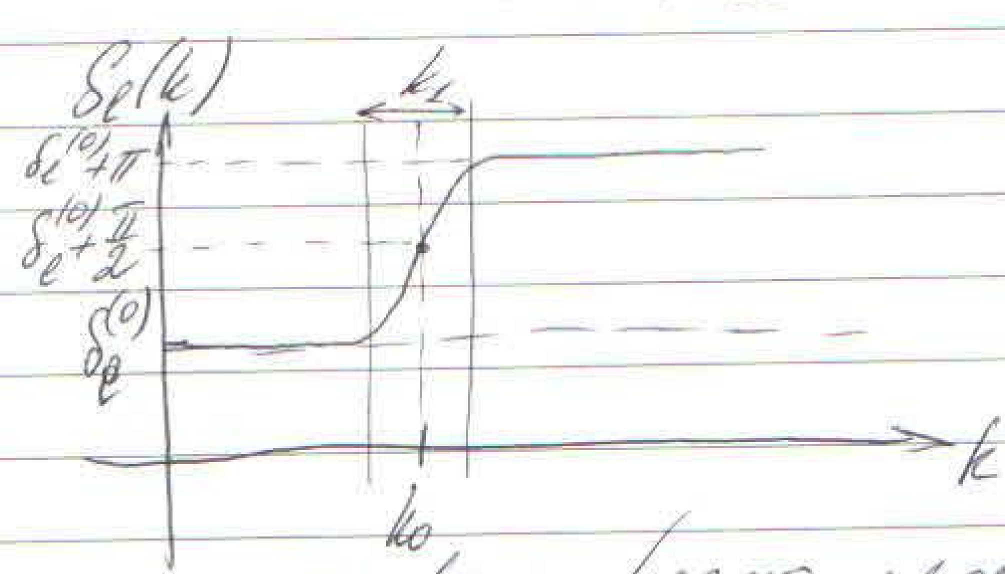
$$B(k_0+\delta k)=\underbrace{B(k_0-ik_1)}_{=0}+\frac{1}{1!}B'(k_0-ik_1)\left[(\cancel{k_0}+\delta k)-(\cancel{k_0}-ik_1)\right]+\dots$$

$$\Rightarrow \delta_l=\frac{\pi(l+1)}{2}-\underbrace{\arg(B)}_{\text{фаза } B}$$

$$\delta_l=\left[\frac{\pi(l+1)}{2}-\underbrace{\arg(B')}_{\text{неизв. что}}\right]-\arg(\delta k+ik_1)=\underset{\uparrow}{\delta_l^{(0)}}-\operatorname{arctg}\frac{k_1}{\delta k}$$

фоновая фаза рассеяния



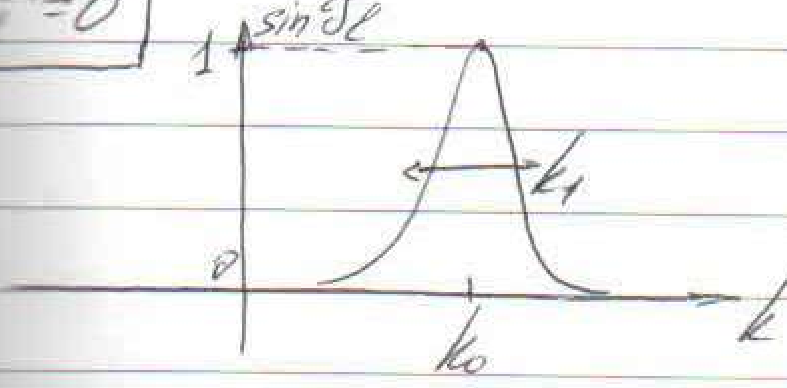


Резонанс — явл., при котором резко происх. изм. фазы рассеяния при $k=k_0$

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

k_0^2 (малый вклад дает)

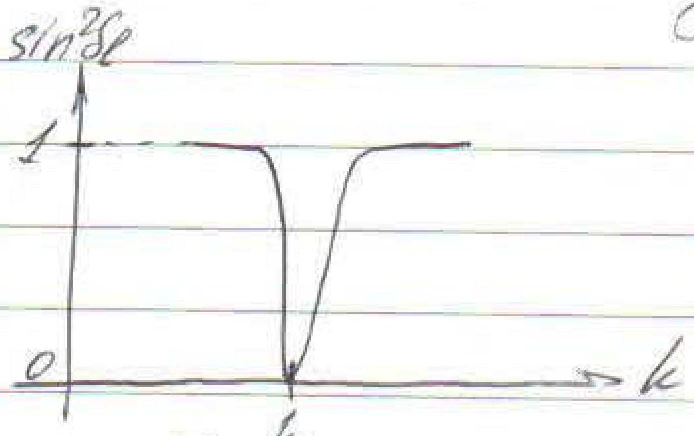
$\boxed{\delta_l^{(0)} = 0}$



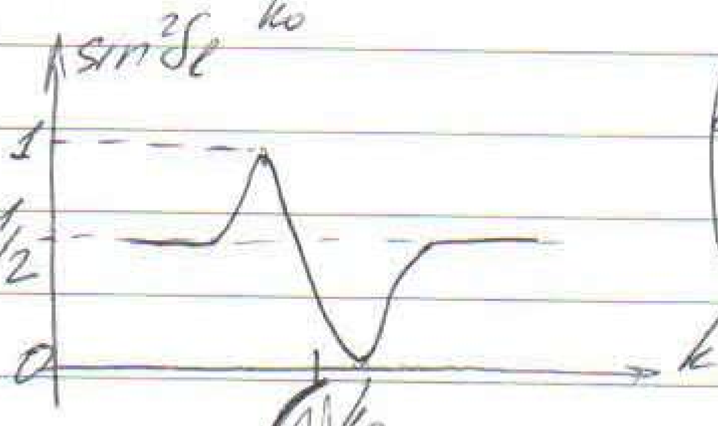
$$\sin^2\delta_l = \sin^2\left(\operatorname{arctg} \frac{k_1}{\delta k}\right) = \frac{k_1^2}{k_1^2 + \delta k^2}$$

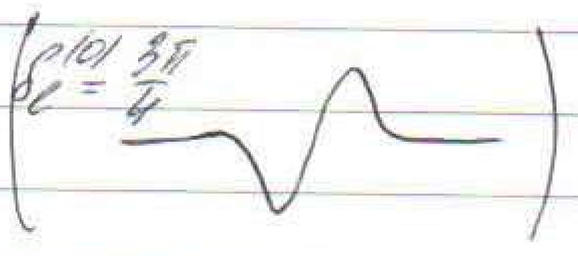
Чем дольше живет, тем уже резонанс.

$\boxed{\delta_l^{(0)} = \frac{\pi}{2}}$



$\boxed{\delta_l^{(0)} = \frac{\pi}{4}}$





колебания
синусоиды + излучение

только при ① резонанс

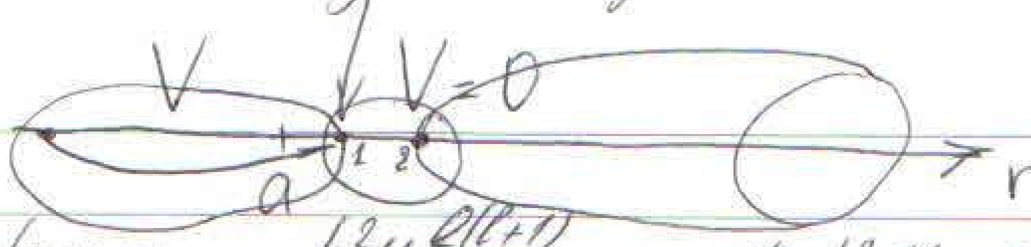
Рассеяние при низких энергиях.

Кин. энергия не имеет значения!

$ka \ll 1$ <-> низкие энергии
(V_0, a)

$$u_l'' + \left(k^2 - \frac{2m}{\hbar^2}V(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) u_l = 0$$

тут тоже не зависит от k



реш. не зависит от k $\left(u_l'' - \frac{l(l+1)}{r^2}u_l = 0\right)$ $k^2 \ll \frac{l(l+1)}{r^2}$ $u_l'' + k^2 u_l = 0$

Что с сшивкой? (1 и 2)

Лекция 13

28 октября

$\Rightarrow u_l \sim r^{l+1}$

$\quad\;\; \sim r^{-l}$

$u_l'' + (0-0-0)u_l = 0$

$u_l = Cr^{0+1} + Dr^{-0}$

в т.1

$R_l = C\cdot\left(\frac{r}{a}\right)^l + D\left(\frac{r}{a}\right)^{-l-1}$ (в обл. где уже нет потенц., но $kr \ll 1$ почувств. дв. частицы)

Если $V \equiv 0$ везде, то $R_l = C\left(\frac{r}{a}\right)^l$

в т.2

$R_l = \frac{w}{\sqrt{r}} \Leftrightarrow u_l = w\cdot\sqrt{r}$

$R_l = Aj_l(kr) + Bn_l(kr)$, j и n – шаровой Бессель и Нейман.

Асимптотика: $R_l = A(kr)^l + B(kr)^{-l-1}$

$A = A(l,k) \quad B = B(l,k)$

$$\left\| \frac{B}{A} = \frac{D}{C}(ka)^{2l+1} \right.$$

На ∞:

$$R_l(r\to\infty) = A\frac{1}{kr}\cos\left(kr - \frac{\pi(l+1)}{2}\right) + \frac{B}{kr}\sin\left(kr - \frac{\pi(l+1)}{2}\right) = \frac{F}{r}\cos\left(kr + \delta_l - \right.$$

$$\left. - \frac{\pi(l+1)}{2}\right) = \frac{F}{r}\cos\left(kr - \frac{\pi(l+1)}{2}\right)\cos\delta_l - \frac{F}{r}\sin\left(kr - \frac{\pi(l+1)}{2}\right)\sin\delta_l$$

$$\Rightarrow \left\| \frac{B}{A} = -\mathrm{tg}\,\delta_l \right.$$

$\Downarrow$

$1 \gg \underset{(ka)}{\delta_0} \gg \underset{(ka)^3}{\delta_1} \gg \delta_2 \gg \ldots$, т.к. $ka \ll 1$

(Если C не близок к 0 (экстремально))

Вывод: Можем ост. s-волну, а ост. несут малы вклад $\Rightarrow$

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

$$= 4\pi(2\cdot 0+1)\cdot\frac{\sin^2\left(\frac{D_0}{C_0}(ka)^1\right)}{k^2} + \cancel{4\pi(2\cdot 1+1)\frac{\sin^2\left[\frac{D_1}{C_1}(ka)^3\right]}{k^2}} + \dots =$$

$$= 4\pi\Big[\underbrace{\frac{D_0}{C_0}a}_{d\sim a}\Big]^2$$

d - длина рассеяния ($\sigma_{tot}=4\pi d^2$)
(не зависит от k и E)

На ∞ $\boxed{\sigma_{tot}=4\pi d^2}$

$$f(\theta)=\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)P_\ell(\cos\theta)\frac{e^{i\delta_\ell}}{k}\sin\delta_\ell \overset{⑧}{=} \underbrace{P_0(\cos\theta)}_{1}\frac{e^{i\delta_0}}{k}\sin\delta_0 = e^{i\delta_0}\frac{kd}{k}$$

$$\boxed{f(\theta)=e^{i\delta_0}\cdot d}$$

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega}=|f(\theta)|^2=d^2}$$ => рассеяние изотропно и сечение от энергии не зависит

Но! $C_0=0 \to tg\delta_0=\infty \Leftrightarrow \delta_0=\frac{\pi}{2} \Rightarrow \sigma_{tot}=\frac{4\pi}{k^2} \leftarrow$ резонанс

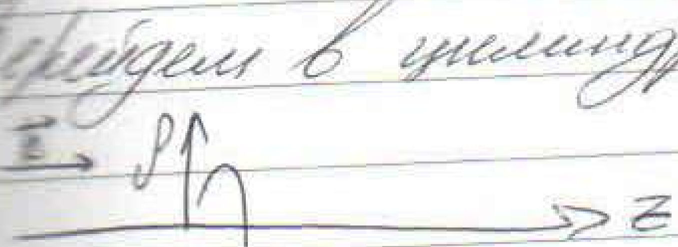
$\sigma_{tot}\sim\frac{1}{E}$, но изотроп. сохр.

$C_1=0 \to tg\delta_1=\infty \Leftrightarrow \delta_1=\frac{\pi}{2} \Rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega}\sim P_1(\cos\theta)^2$ ∞
↘ нет изотр., есть зав. от E

Рассеяние при высоких энергиях

$ka\gg 1$ ⊕ $\frac{\hbar^2}{2m}k^2\gg V_0$ (хотя обычно этого усл. нет)
(из оптики)

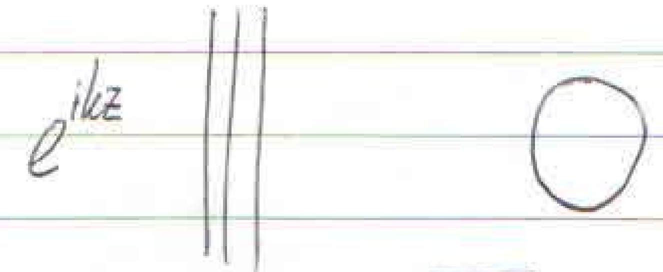
Перейдем в цилиндр. систему координат



$$V(r)=V(\rho,z)=V\left(\sqrt{\rho^2+z^2}\right)$$

$$\psi(\rho,z)=e^{i\int_{-\infty}^{z}dz\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(\rho,z))}}$$ (применимо при $k_z'+k_\rho'\ll k^2$)

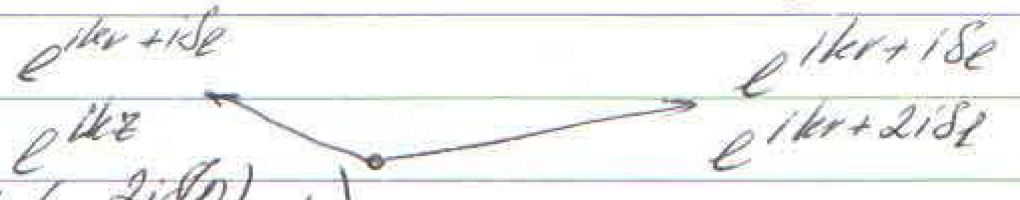
Есть лучи, вдоль них фазовый набег.



$$\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E-\frac{2m}{\hbar^2}V(\rho,z)}=\sqrt{k^2-\frac{2m}{\hbar^2}V(\rho,z)}=k\sqrt{1-\frac{2m}{\hbar^2}\frac{V(\rho,z)}{k^2}}=k\Big(1-\frac{1}{2}\frac{2m}{\hbar^2 k}$$

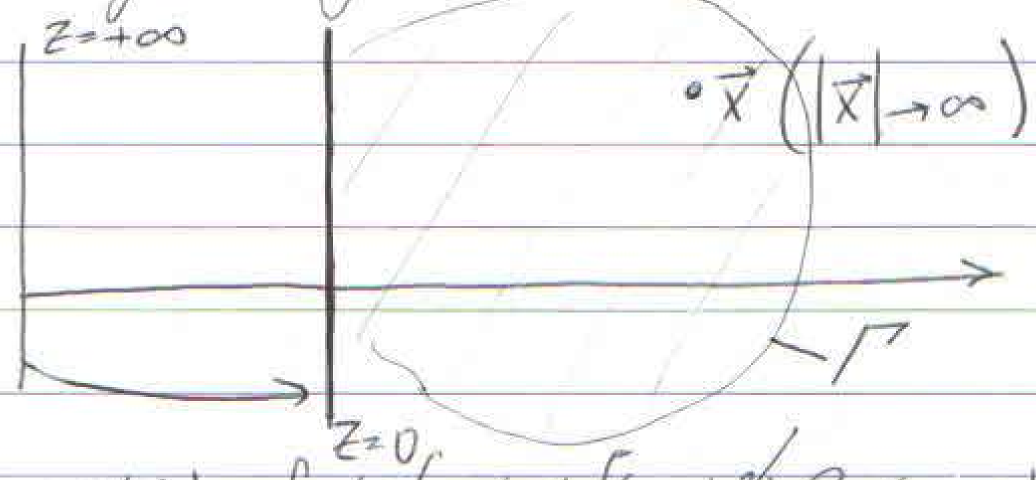
$$=k-\frac{1}{2}\frac{2m}{\hbar^2}\frac{V}{k}$$

$$\psi(\rho,z)\Big|_{z\to\infty}=e^{ikz-i\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{2}\frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{k}V(\rho,z)dz}=e^{ikz+i2\delta(\rho)}\ominus$$



$$\ominus\ e^{ikz}+e^{ikz}\left(e^{2i\delta(\rho)}-1\right)$$

Надо получить $-e^{ikz}+\frac{e^{ikr}}{r}f(\theta)$.



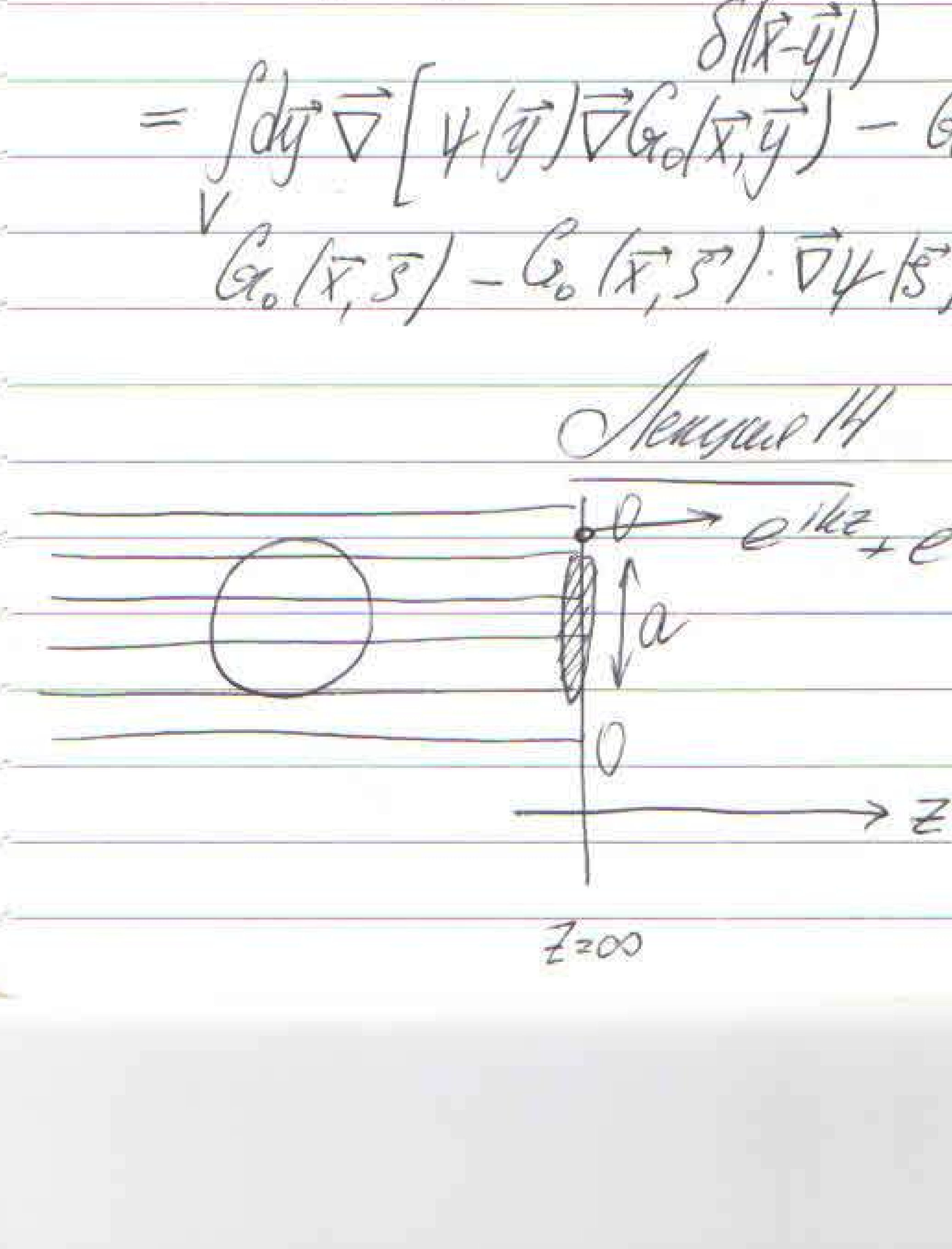
$$\psi(\vec{x})=\int_V d\vec{y}\Big\{\psi(\vec{y})\Big[\underset{\delta(|\vec{x}-\vec{y}|)}{\underbrace{(\Delta_y+\cancel{k^2})G_0(\vec{x},\vec{y})}}\Big]-G_0(\vec{x},\vec{y})\big[(\Delta_y+\cancel{k^2})\psi(\vec{y})\big]\Big\}=$$

$$=\int_V d\vec{y}\,\vec{\nabla}\Big[\psi(\vec{y})\vec{\nabla}G_0(\vec{x},\vec{y})-G_0(\vec{x},\vec{y})\vec{\nabla}\psi(\vec{y})\Big]=\int_\Gamma d\vec{s}\Big[\psi(\vec{s})\vec{\nabla}G_0(\vec{x},\vec{s})-G_0(\vec{x},\vec{s})\cdot\vec{\nabla}\psi(\vec{s})\Big]=\Big|\Gamma\xrightarrow[(|\vec{x}|\to\infty)]{}z=0\Big|\ominus$$

Лекция 14

7 ноября

$$e^{ikz}+e^{ikz}\left(e^{2i\delta(\rho)}-1\right)$$



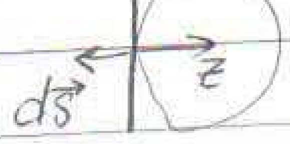
$$G_0(\vec x,\vec s)\Big|_{|\vec x|\to\infty} = \frac{e^{ik|\vec x|}}{|\vec x|}\left[-\frac{1}{4\pi}e^{-i\vec k'\vec s}\right], \text{ где } \underset{\text{волн. число рассеян. волны}}{\vec k'} = k\frac{\vec x}{|\vec x|}$$

Обозначения: $\vec k' = k(\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \underset{\text{угол рассеян.}}{\cos\theta})$

$$\vec s = (\rho\cos\varphi', \rho\sin\varphi', \underset{\text{на пл-ти } z\equiv 0}{z})$$

$$\vec k'\vec s = k\rho\sin\theta(\underbrace{\cos\varphi\cos\varphi'+\sin\varphi\sin\varphi'}_{\cos(\varphi-\varphi')}) + k\cos\theta\cdot z$$

$$d\vec s\cdot\vec\nabla_s = \rho d\rho d\varphi'\left(-\frac{\partial}{\partial z}\right)$$



$\Rightarrow$

$$\Rightarrow \psi(\vec x)\Big|_{|\vec x|=r\to\infty} = \frac{e^{ikr}}{r}\left(-\frac{1}{4\pi}\right)\iint\limits_{\text{пл}}\rho d\rho d\varphi'\Big[e^{ikz}(e^{2i\delta(\rho)}-1)\cdot\left(-\frac{\partial}{\partial z}\right)\cdot e^{-ik\rho\sin\theta\cos(\varphi-\varphi')-ik\cos\theta\cdot z}\Big|_{z=0} - e^{-ik\rho\sin\theta\cos(\varphi-\varphi')-ik\cos\theta\cdot z}\left(-\frac{\partial}{\partial z}\right)\cdot e^{ikz}(e^{2i\delta(\rho)}-1)\Big]\Big|_{z=0}\Big] =$$

$$= \frac{e^{ikr}}{r}\left(-\frac{1}{4\pi}\right)\iint\limits_{\text{пл}}\rho d\rho d\varphi'\left[e^{ik0}(e^{2i\delta(\rho)}-1)(ik\cos\theta)e^{-ik\rho\sin\theta\cos(\varphi-\varphi')} + e^{-ik\rho\sin\theta\cos(\varphi-\varphi')-ik\cos\theta 0}\cdot ik\cdot(e^{2i\delta(\rho)}-1)\right] = \frac{e^{ikr}}{r}\left(-\frac{1}{4\pi}\right)\iint\rho d\rho d\varphi(e^{2i\delta(\rho)}-1)\cdot e^{-ik\rho\sin\theta\cos(\varphi-\varphi')}(ik\cos\theta+ik) = \left|\begin{aligned}&\int_0^{2\pi}e^{iz\cos\varphi'}d\varphi' = 2\pi J_0(z)\\&\int_0^{2\pi}e^{-iz\cos\varphi'}d\varphi' = 2\pi J_0(z)\\&\int_0^{2\pi}e^{-iz\cos(\varphi'-\varphi)}d\varphi' = 2\pi J_0(z)\end{aligned}\right| =$$

$$= \frac{e^{ikr}}{r}\left(-\frac{1}{4\pi}\right)\int^{\infty}\rho d\rho\,(e^{2i\delta(\rho)}-1)\cdot J_0(k\rho\sin\theta)\,ik(\cos\theta+1)\cdot 2\pi$$

$$\Rightarrow \frac{1}{2}\int_0^{\infty}\rho d\rho(1-e^{2i\delta(\rho)})\cdot J_0(k\rho\sin\theta)\,ik(\cos\theta+1) \text{ — ампл. рассеяния}$$

$$f_\theta = \frac{ik(\cos\theta+1)}{2}\int_0^{\infty}\rho d\rho(1-e^{2i\delta(\rho)})J_0(k\rho\sin\theta) \Rightarrow$$

$$f_\theta = \int_0^{\infty}\rho d\rho\, k^2(1+\cos\theta)\frac{1}{2ik}(e^{2i\delta(\rho)}-1)J_0(k\rho\sin\theta),$$

где $2\delta(\rho) = -\frac{1}{2}\cdot\frac{1}{k}\,\frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty}dz\,V(\sqrt{\rho^2+z^2})$

Свойства:

1 $k\rho \gg 1 \Rightarrow k\rho\cos\theta$ при быстро осцил. $\cos\theta$ дает $f_\theta=0$.

$\Rightarrow$ большая кин. энергия $\leftrightarrow$ отклонения малы.

2. f_θ в этой записи не что иное как парц. разложение

$$\overset{\text{орбит. мом.}}{l} = \frac{1}{\hbar} L = \frac{1}{\hbar} p \cdot \rho = k\rho$$

$$\Rightarrow f_\theta = \int_0^\infty l\,dl \cdot 2 \cdot \frac{1}{2ik_\rho}\left(e^{2i\delta(l)} - 1\right) J_0(l \sin\theta) =$$

$$= |l\text{-большие}| = \int_0 (2l+1)dl\, \underbrace{\frac{1}{2ik}\left(e^{2i\delta l} - 1\right)} J_0(l \sin\theta) =$$

$$= \left| \text{при } \begin{matrix} l \gg 1 \\ \theta \ll 1 \end{matrix} \; J_0(l \sin\theta) \equiv P_l(\cos\theta) \right| \xRightarrow{f_l} f_\theta$$

$$f_\theta = \int_0^\infty (2l+1) f_l \cdot P_l(\cos\theta)\,dl = |dl = 1| = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l P_l(\cos\theta)$$ при $\theta \ll 1$.

3. $\delta(\rho) \approx \delta_l$ при $l = k\rho$.

Трошкай, теория переходов.

Теория перехода

(По мнению С. это ТП =))

Переход – это переход под действием $\mathcal{H}_I$

$\overset{1}{\overline{}}$ $\overset{2}{\overline{}}$

$|\psi_1\rangle$ $|\psi_2\rangle$ (вер. уровень)

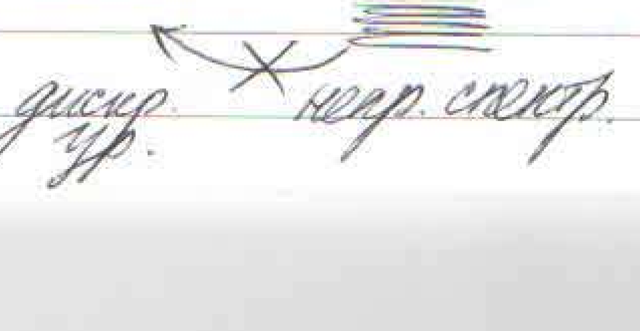
$P_1(t=0) = 1$

$\langle\psi_2|\mathcal{H}_I|\psi_1\rangle \neq 0$] ⇒ единич. вер-ть перетекает, после накопления вер-ть будет перетекать назад.

$(\langle\psi_1|\mathcal{H}_I|\psi_2\rangle \neq 0)$

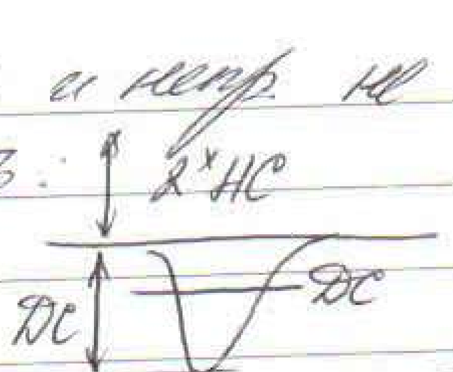
$P_1 = \cos^2\gamma t \quad P_2 = \sin^2\gamma t$

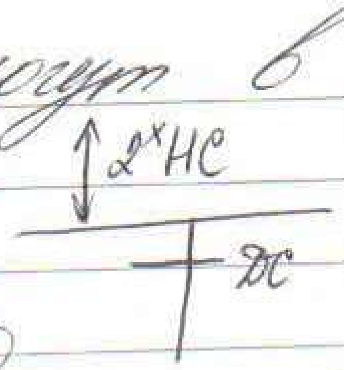
1) Распад произойдет, если вер-ть на 2 не накапливает, то так, когда у 2 на самом деле ∞ много дискр. уровней.



Нет обр. потока вер-ти.

Эн. дискр. и непр. не могут в норм. потенциале совпадать:





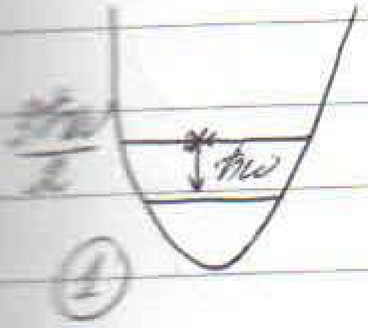
Но если система составная, то это совпадение возможно:

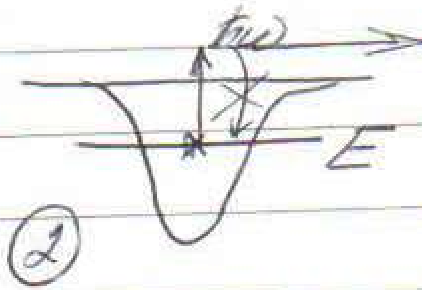
$$\mathcal{H} = \underbrace{\frac{p_1^2}{2m} + \frac{kx_1^2}{2}}_{\hbar\omega(n+1/2)} + \underbrace{\frac{p_2^2}{2m} + V(x_2)}_{1\text{ ДС и }2^x\text{НС}} + \underbrace{W(x_1, x_2)}_{\mathcal{H}_I}$$

$|n=1\rangle \cdot \Psi_E(x_2) \leftarrow$ дискр. спектр. $\longleftrightarrow E = \hbar\omega\frac{3}{2} + \underbrace{E}_{<0} \ominus \hbar\omega\frac{1}{2} + \frac{\hbar^2}{2m}k^2 \Rightarrow \boxed{k}$

соотв. рав-

$\Rightarrow |n=0\rangle \cdot \frac{e^{ikx_2}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ - непр. спектр с $E = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar^2k^2}{2m}$ ву энергий



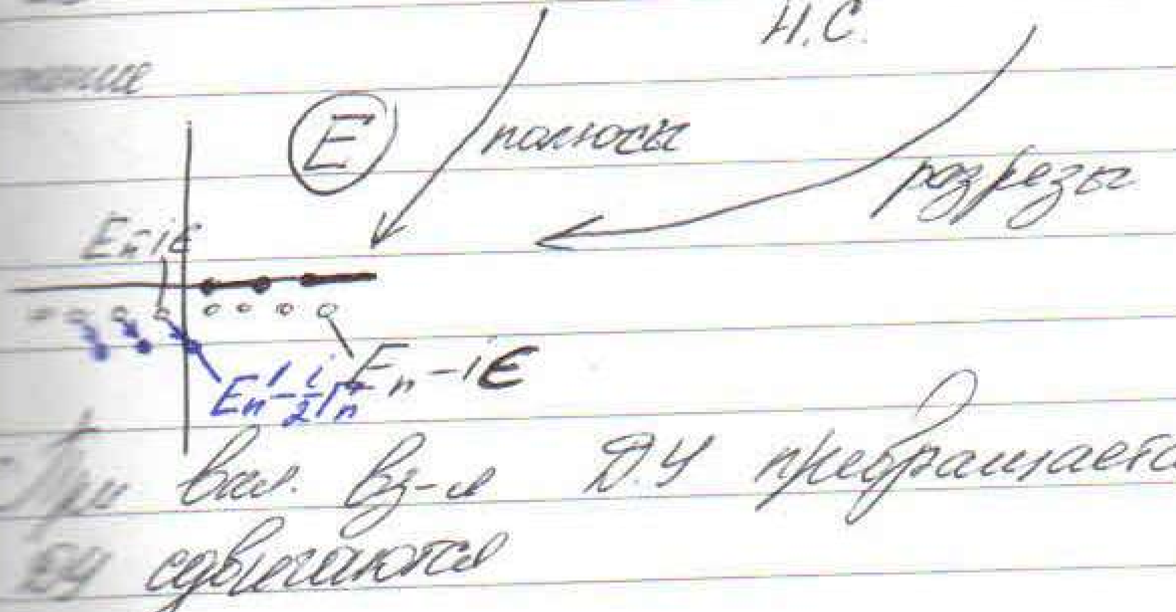


$W(x_1, x_2)$ позволит осцил. опуститься вниз на $\frac{\hbar\omega}{2}$, а вторая част. поднимется на $\hbar\omega$.

Именно поэтому распад в непр. спектр. (ТОЛЬКО)

Техника замеч. в исп. функции Грина: $G(E) = \frac{1}{E-\mathcal{H}+i\epsilon} =$

$$= \sum_{ДС} |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n| \frac{1}{E-E_n+i\epsilon} + \underbrace{\int d\varepsilon |\Psi_\varepsilon\rangle\langle\Psi_\varepsilon| \frac{1}{E-\xi+i\epsilon}}_{Н.С.}, \text{ где } E \in \mathbb{C}(\forall)$$



При вкл. вз-я Д.У превращается в Метастабильной, Д.У сдвигаются

Дальше будем считать, что н.с. нет. Т.е. система в [illegible], у сист. чисто Д.С.

Как $G(E) = \sum\limits_{\text{Д.С.}} \frac{|\psi_n\rangle\langle\psi_n|}{E - E_n + i\epsilon}$ связ. с динамикой?

Зная $G(E)$ знаем дин. системы

$$X = -\frac{1}{2\pi i}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dE\, e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \frac{1}{\underset{(\epsilon\to 0)}{E - E_n + i\epsilon}} =$$

← т.к. $e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \to 0$ при $E \to \infty$

$$= -\frac{1}{2\pi i}(-1)\, 2\pi i \cdot 1 \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n t)} = e^{\frac{-iE_n t}{\hbar}}$$

$$-\frac{1}{2\pi i}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dE \cdot G(E)\, e^{\frac{-iEt}{\hbar}} = \sum_{\text{Д.С.}}{}' |\psi_n\rangle\langle\psi_n|\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

опер. эволюции для конс. системы

Пусть $|\psi_n\rangle \longleftrightarrow H_0$ и ВФ сист. в нач. момент времени и есть $|\psi_n\rangle$, т.е. $|\psi(t=0)\rangle = |\psi_n\rangle$, то

$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\psi_n\rangle$ — эта эволюция опис. распад метастаб. уровня $(H = H_0 + H_I)$

Хотим найти $\overset{\circ}{c}_n(t) = \langle\psi_n|\psi(t)\rangle$ $\quad (P_n(t) = |c_n(t)|^2)$

$c_m(t) = \langle\psi_m|\psi(t)\rangle$ — переход в др. сост

$(P_m(t) = |c_m(t)|^2)$

Лекция 15

11 ноября

$$\boxed{e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = -\frac{1}{2\pi i}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dE\, \underbrace{\hat{G}(E)}_{\frac{1}{E - H + i\epsilon}}\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}}$$

$c_n(t) = \langle\psi_n|\psi(t)\rangle$; $P_n = |c_n(t)|^2$ — убывает

$c_m(t) = \langle\psi_m|\psi(t)\rangle$; $P_n = |c_m(t)|^2$ — прибывает

$$c_n(t) = \langle\psi_n|\psi(t)\rangle = \langle\psi_n|e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\psi_n\rangle = -\frac{1}{2\pi i}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dE\, \langle\psi_n|G|\psi_n\rangle\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

$$G(E) = \frac{1}{E - H + i\epsilon} \Longrightarrow (E - \underset{H_0 + H_I}{\overset{\parallel}{H}} + i\epsilon)\, G(E) = 1.$$

$$(E - H_0 + i\epsilon)\, G = 1 + H_I G(E)$$

$$G = \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} + \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon}\, \overset{\frown}{G(E)H_I} = G_0(E) + G_0(E) H_I G_0(E)$$

$$G = G_0(E) + G_0(E) H_I G_0(E) + G_0(E) H_I \overset{G_0(E) H_I}{G(E)} = G_0(E) + G_0 H_I G_0 +$$

$$+ G_0 H_I G_0 H_I G_0 + G_0 H_I G_0 H_I G_0 H_I G_0 + \ldots$$ – ряд Т.В. для ф. Грина.

Но это не то, т.к. полюс $\frac{1}{E-E_n+i\epsilon} \longrightarrow$ полюс $\frac{1}{E-E_n'+\frac{i}{2}\Gamma_n'}$, а в этом ряду полюса стоят там, где стоят.

После суммирования ряда $\frac{1}{1-\delta} = 1+\delta+\delta^2+\ldots$

Теперь та теория возм., что нам нужна:
(она строгая для матр. эл-в)

$$(E-H_0+i\epsilon)G(E) = 1 + H_I G(E)$$

$$\langle\psi_n|(E-H_0+i\epsilon)G|\psi_n\rangle = 1 + \langle\psi_n|H_I \cdot 1 \cdot G(E)|\psi_n\rangle$$

$$(E-E_n+i\epsilon)\underbrace{\langle\psi_n|G|\psi_n\rangle}_{G_{nn}(E)} = 1 + \langle\psi_n|H_I \cdot 1 \cdot G(E)|\psi_n\rangle$$

имеет 0 пор-к
малости по 1: $\underline{\underline{O}}(1)$

тоже для недиаг. эл-в:

$$(E-E_m+i\epsilon)\underbrace{\langle\psi_m|G(E)|\psi_n\rangle}_{G_{mn}(E) \sim \underline{\underline{O}}(H_I^1)} = \langle\psi_m|H_I \cdot 1 \cdot G(E)|\psi_n\rangle \ominus$$

$$1 = \sum_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k| = |\psi_n\rangle\langle\psi_n| + \sum_{m\neq n}|\psi_m\rangle\langle\psi_m|$$

$$\ominus\ \underbrace{\overset{\underline{\underline{O}}(H_I^1)}{\langle\psi_m|H_I|\psi_n\rangle} \cdot \overset{\underline{\underline{O}}(1)}{\langle\psi_n|G(E)|\psi_n\rangle}}_{\sim \underline{\underline{O}}(H_I^1)} + \sum_{m\neq n} \underbrace{\overset{\underline{\underline{O}}(H_I^1)}{\langle\psi_m|H_I|\psi_m\rangle}\overset{\underline{\underline{O}}(H_I^1)}{\langle\psi_m|G(E)|\psi_n\rangle}}_{\sim \underline{\underline{O}}(H_I^2)}$$

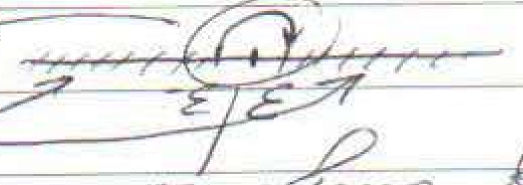
$$\Rightarrow G_{mn}(E) = \frac{\langle\psi_m|H_I|\psi_n\rangle}{E-E_m+i\epsilon}\underset{?}{\widetilde{G_{nn}}}$$

$$(E-E_n+i\epsilon)\,\underset{\sim\sim}{G_{nn}(E)} = 1 + \underbrace{\overset{E_n^{(1)}}{\langle\psi_n|H_I|\psi_n\rangle} \cdot \overset{G_{nn}(E)}{\langle\psi_n|G(E)|\psi_n\rangle}}_{\sim \underline{\underline{O}}(H_I^1)} + \sum_{m\neq n}\langle\psi_n|H_I|$$

$$\cdot\,\psi_m\rangle\langle\psi_m|G(E)|\psi_n\rangle = 1 + E_n^{(1)}\,\underset{\sim\sim}{G_{nn}}(E) + \sum_{m\neq n}\frac{\langle\psi_n|H_I|\psi_m\rangle}{E-E_m+i\epsilon}\langle\psi_m|H_I|\psi_n\rangle\,\underset{\sim\sim}{G_{nn}(E)}$$

$$G_{nn}(E) = \frac{1}{E-E_n+i\epsilon-E_n^{(1)}-\sum\limits_{m\neq n}\frac{|\langle\psi_m|H_I|\psi_n\rangle|^2}{E-E_m+i\epsilon}}$$

$$\frac{1}{x+i\epsilon} = \underset{\text{гл. зн.}}{V.p.}\frac{1}{x} - \pi i\delta(x)$$



половина вычета

$$E_n^{(2)}(E) \equiv \sum_{m\neq n} V_p \frac{1}{E-E_n} |<\psi_m|H_I|\psi_n>|^2$$

$$\frac{1}{2}\Gamma_n(E) \equiv \pi \sum_{m\neq n} |<\psi_m|H_I|\psi_n>|^2 \cdot \delta(E-E_n)$$

$$\boxed{G_{nn}(E) = [E - \overbrace{E_n - E_n^{(1)} - E_n^{(2)}(E)}^{-E_n'} + \frac{i}{2}\Gamma_n(E) + \cancel{\ }]^{-1}}$$

Полюс этой дроби?

0 пор-к: E_n

1 пор-к: $E_n + E_n^{(1)}$

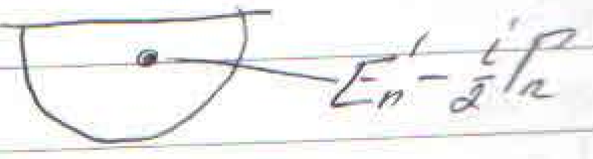
2 пор-к:

$$E_n + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} - \frac{i}{2}\Gamma_n \Leftarrow \left[\begin{array}{l} E_n^{(2)}(E_n) = \sum\limits_{m\neq n} \frac{|<\psi_m|H_I|\psi_n>|^2}{E_n - E_m} \equiv E_n^{(2)} \\ \uparrow \text{ т.к. именно так 2ой пор-к.} \\ \Gamma_n(E_n) \equiv \Gamma_n \equiv 2\pi \sum\limits_{m\neq n} |<\psi_m|H_I|\psi_n>|^2 \delta(E_n - E_m) \end{array}\right.$$

характеризует ЗЭ. (док., что распад в непр. спектр)

$$\Rightarrow E_n' = E_n + E_n^{(1)} + E_n^{(2)}$$

$$C_n(t) = -\frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty} dE\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \underbrace{G_{nn}(E)}_{\text{полюс в точке } E_n' - \frac{i}{2}\Gamma_n} \ominus$$



$$\ominus -\frac{1}{2\pi i}(-2\pi i)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n't - \frac{\Gamma_n}{2\hbar}t\right)$$

$$P_n = |C_n(t)|^2 \equiv \exp\left(-\frac{\Gamma_n}{\hbar}t\right) \equiv e^{-\frac{t}{\tau_n}}, \quad \tau_n = \frac{\hbar}{\Gamma_n}$$

именно δ-ф-я (отсюда закон сохр. эн.)

$$\boxed{\frac{1}{\tau_n} = \nu_n = \frac{\Gamma_n}{\hbar} = \frac{2\pi}{\hbar}\sum_{m\neq n} |<\psi_m|H_I|\psi_n>|^2 \delta(E_n - E_m)}$$

Золотое правило Ферми

Форма линий. Соотношение неопр. Бора

$H_0 \rightarrow |\psi_n>$

$H_0 + H_I \rightarrow$ М.У., что ЛК Н.С.

$|\psi_n> = \int_{Н.С.} dE\, f(E) |\psi_E>$ – спектр. разложение, можно и в фикс. момент.

сост. непр. спектра $(P(E) \equiv |f(E)|^2)$ $\quad |\psi(t)> = \int_{Н.С.} dE\, f(E) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} |\psi_E>$

$$c_n(t) = \langle \psi_n | \Phi'(t)\rangle = \int d\varepsilon' f^*(\varepsilon')\langle\psi_{\varepsilon'}| \int d\varepsilon\, f(\varepsilon) e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon t}|\psi_\varepsilon\rangle =$$

$$= \int d\varepsilon' f^*(\varepsilon') \int d\varepsilon\, f(\varepsilon) e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon t}\delta(\varepsilon'-\varepsilon) = \int d\varepsilon |f(\varepsilon)|^2 e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon t}.$$

$$\int d\varepsilon \underbrace{|f(\varepsilon)|^2}_{P(\varepsilon)} e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon t} = c_n(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n' t - \frac{\Gamma_n}{2\hbar}t}$$

Обр. преобр. Фурье сделать не можем, т.к. это $\angle$ при $t \geq 0$

Сопряжем тождество: $\int d\varepsilon |f(\varepsilon)|^2 e^{\frac{i}{\hbar}\varepsilon t} = c_n^*(t)$

$$c_n^*(-t) = c_n(t) = e^{\frac{i}{\hbar}E_n' t - \frac{\Gamma_n}{\hbar}t}$$

$$\Rightarrow \int d\varepsilon |f(\varepsilon)|^2 e^{\frac{i}{\hbar}\varepsilon t} = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n' t + \frac{\Gamma_n}{2\hbar}t} \quad (t<0)$$

$\Rightarrow c_n(t)$ убывает в обе стороны

$$P(\varepsilon) = |f(\varepsilon)|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{\frac{i}{\hbar}\varepsilon t} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}E_n' t - \frac{\Gamma_n}{2\hbar}|t|} \Rightarrow$$

убывает и в обл. $t>0$, и в обл. $t<0$.

$$P(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi\hbar}\left[\frac{1}{\frac{\Gamma_n}{2\hbar} + \frac{i}{\hbar}E_n' - \frac{i}{\hbar}\varepsilon} + \frac{1}{\frac{\Gamma_n}{2\hbar} - \frac{i}{\hbar}E_n' + \frac{i}{\hbar}\varepsilon}\right]$$

$$\boxed{P(\varepsilon) = \frac{1}{\pi}\frac{(\Gamma_n/2)}{(E_n'-\varepsilon)^2 + \left(\frac{\Gamma_n}{2}\right)^2}}$$

вер-ть иметь эн-гию ε

$\leftarrow$ это и есть форма линии (распр. по эн. тех частиц, что мы ловим на ∞)

Лекция 16

18 ноября

$$\frac{1}{\tau_n} = \frac{\Gamma_n}{\hbar} = \frac{2\pi}{\hbar}\sum_m |\langle\psi_m|H_I|\psi_n\rangle|^2 \delta(E_m - E_n)$$

$$P(\varepsilon) = \frac{1}{\pi}\frac{(\Gamma_n/2)}{(E_n'-\varepsilon)^2 + \left(\frac{\Gamma_n}{2}\right)^2}$$

лоренц. линия

Тут, в отличие от ЗПФ энергия не точна, набл. дисперсия. Это объясняет конечную ширину линии (в спектроскопе), $P(\varepsilon)$ опред. „форму" линии

„линии"

- Линия яркая (τ мало) $\rightarrow$ (Γ) широкая линия (I пор. Т.В.)
- Линия бледная (τ велико) $\rightarrow$ (Γ) узкая линия (I пор. Т.В.)
- Линия бледная, но она широкая ($n \rightarrow m$) (во II пор. Т.В)

Разберемся с соотн. неопр. Бора.

Соотн. неопр. Г. (точная теорема):

Если $[A,B]\neq 0$, то $\Delta A\cdot\Delta B \geq \frac{1}{4}\langle\underbrace{\frac{[A,B]}{i}}_{=C}\rangle^2$ $\left(\Delta p\,\Delta x\geq\frac{\hbar^2}{4}\right)$

$([A,B]=iC)$

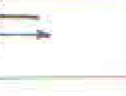
Но время – число (не оператор). Поэтому соотн. неопр. Бора пишется из этого соотношения: $\frac{1}{\tau_n}=\frac{\Gamma_n}{\hbar}$

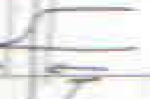
$\tau_n\cdot\Gamma_n\geq\hbar \iff \boxed{\Delta t\cdot\Delta E\geq\hbar}$ – соотн. неопр. Бора

Мгновенные переходы

ДАЛЕЕ – ВЕЗДЕ $H_I(t)$

(был 0, а стал H_I ← в этом смысле)

$H_I(t)=H_I\cdot\Theta(t)$ 

Но на самом деле есть τ, т.е. хар-ное время. 

Если излучение, то речь об излуч. частотах и их периодах, т.е. мгновенный переход, если $\tau\ll\frac{1}{\omega_{mn}}$.

Если в момент $t=-\varepsilon$ волн. ф-я $|\psi_n\rangle$, то из нестац. ур-я Шр.

$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle=\underset{(H_0+H_I(t))}{H(t)}|\psi(t)\rangle$, получаем, что $|\psi(+\varepsilon)\rangle=|\psi_n\rangle+2\varepsilon\frac{1}{i\hbar}\cdot H(0)|\psi(0)\rangle$ (вообще $t\,\forall$) $\varepsilon\to 0$

При конечных скачках Гамильтониана в.ф. не меняется

$\boxed{|\psi(+\varepsilon)\rangle=|\psi_n\rangle}$ – принцип Кондона

Было $|\psi_n\rangle$, $H_I=0$ $\longrightarrow$ стало $|\psi_n'\rangle$, $H_I\neq 0$

Т.е. задача о том, какова вер-ть оказаться на $|\psi_n'\rangle$ (на новом дискр. уровне) известна: $P_m=|\langle\psi_m'|\psi_n\rangle|^2$ в этом и есть неизм. после перехода в.ф.

$|\psi_m'\rangle=|\psi_m\rangle+\sum_{n\neq m}\frac{\langle\psi_n|H_I|\psi_m\rangle}{E_m-E_n}|\psi_n\rangle$

$P_m=\left|\frac{\langle\psi_n|H_I|\psi_m\rangle}{E_m-E_n}\right|^2$ $\left(\langle\psi_m|\psi_n\rangle=0,\ \sum_{n\neq m}\langle\psi_n|\psi_n\rangle=1\right)$

Далее везде $\langle\psi_n|H_I|\psi_n\rangle=0$ $(E_n^{(1)}=0)$

Представление Дирака. Нестационарная ТВ.

Нестац. ТВ выводится многими способами. Мы рассмотрим, исп. представл. Дирака (так удобнее)

Предст. Гайзенберга: $\rho_{Г}(t)=\rho_{Г}(0)$ $\qquad A_{Г}(0)=A_{Ш}(0)=A_{D}(0)$
(ПГ) $\qquad$ [чс $|\psi_{Г}(t)\rangle = |\psi_{Г}(0)\rangle$]
но! $\frac{d}{dt}A_{Г}(t)=0+\frac{i}{\hbar}[H,A_{Г}(t)]$ (конс. сист.)
решение $A_{Г}(t)=e^{\frac{i}{\hbar}Ht}A_{Г}(0)e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$

Предст. Шредингера: $A_{Ш}(t)=A_{Ш}(0)$
(ПШ) $\qquad$ но! $i\hbar\frac{d}{dt}\rho_{Ш}(t)=[H,\rho_{Ш}(t)]$
[чс: $i\hbar\frac{d}{dt}|\psi_{Ш}(t)\rangle = H|\psi_{Ш}(t)\rangle$]

Предст. Дирака: $\boxed{A_{D}(t)=e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}A_{D}(0)e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}}$
(ПД) $\qquad \boxed{|\psi_{D}(t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}|\psi_{Ш}(t)\rangle}$

диф-ем и умн. на $i\hbar$: $i\hbar\frac{d}{dt}|\psi_{D}(t)\rangle = -H_0e^{i\hbar H_0t}|\psi_{Ш}(t)\rangle + H|\psi_{Ш}(t)\rangle\cdot e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}$
$= -H_0e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}|\psi_{Ш}(t)\rangle + (H_0+H_I(t))|\psi_{Ш}(t)\rangle e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}$

$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi_{D}(t)\rangle =$ ~~$H_0|\psi_{D}(t)\rangle + H_0|\psi_{D}(t)\rangle + H_I(t)|\psi_{Ш}(t)\rangle e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}$~~ $=$
$= -H_0|\psi_{D}(t)\rangle + (H_0+H_I(t))e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}|\psi_{Ш}(t)\rangle e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} =$
$= -H_0|\psi_{D}(t)\rangle + (H_0+H_I(t))e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}|\psi_{D}(t)\rangle e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} =$
$= -\cancel{H_0|\psi_{D}(t)\rangle} + \cancel{H_0|\psi_{D}(t)\rangle} + e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}H_I(t)e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}|\psi_{D}(t)\rangle =$
$= H_{I_D}(t)|\psi_{D}(t)\rangle$

$$\boxed{i\hbar\frac{d}{dt}|\psi_{D}(t)\rangle = H_{I_D}(t)\cdot|\psi_{D}(t)\rangle}$$

В начале $|\psi(t=0)\rangle = |\psi_n\rangle$ (сидим на n-ом уровне). Ищем $|\psi_{D}(t)\rangle = \sum_m C_m(t)|\psi_m\rangle$ (как разложение по базису)

$\langle\psi_k|\psi_{D}(t)\rangle = \langle\psi_k|\sum_m C_m(t)|\psi_m\rangle = C_k\langle\psi_k|\psi_m\rangle \quad (m=k)$

$\Rightarrow i\hbar\dot{C}_k = \langle\psi_k|H_{I_D}(t)\sum_m C_m(t)|\psi_m\rangle = \sum_m\langle\psi_k|e^{+\frac{i}{\hbar}H_0t}H_{IШ}(t)e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}|\psi_m\rangle$
$\cdot C_m(t) = \sum_m e^{\frac{i}{\hbar}E_kt}\cancel{H_{IШ}(t)}e^{-\frac{i}{\hbar}E_mt}C_m(t)\langle\psi_k|H_{IШ}|\psi_m\rangle$

$e^{\frac{i}{\hbar}(E_k-E_m)t} = e^{i\omega_{km}t}$

$$i\hbar\dot{C}_k = \sum_m e^{i\omega_{km}t}\overbrace{\langle\psi_k|H_{I\text{ш}}(t)|\psi_m\rangle}^{V_{km}(t)}C_m(t)$$

$$\boxed{i\hbar\dot{C}_k = \sum_m e^{i\omega_{km}t}V_{km}(t)C_m(t)}$$

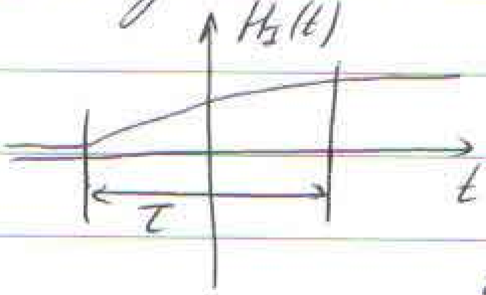
V_{km} – маленький, что $C_k^{(0)} \gg C_k^{(1)} \gg C_k^{(2)}$.

$\Rightarrow \boxed{\dot{C}_k^{(0)} = 0} \Rightarrow C_k^{(0)} = 1,\ C_{m\neq k}^{(0)} = 0.$

По порядкам: $i\hbar\dot{C}_k^{(s+1)} = \sum_m e^{i\omega_{km}t}V_{km}(t)C_m^{(s)}(t)$

$\Rightarrow \boxed{i\hbar\dot{C}_k^{(1)}(t) = e^{i\omega_{km}t}V_{km}(t)\cdot 1}$ (какое-то m из всех ур.)

$\boxed{I}$ Адиабатический переход (обратно мгновенному переходу)



Если $\tau \gg \frac{1}{\omega_{mn}}$, то переход считается адиаб.

$$C_k(t)\Big|_{t\to\infty} = \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} e^{i\omega_{km}t}V_{km}(t)\,dt = -V_{km}(t)\frac{1}{\hbar\omega_{km}}e^{i\omega_{km}t}\Big|_{-\infty}^{t} + \underbrace{\frac{1}{\hbar\omega_{km}}\int_{-\infty}^{t}\frac{dV_{km}(t)}{dt}e^{i\omega_{km}t}\,dt}_{=0,\text{ т.к. } e^{i\omega_{km}t}\text{ – быстроосц. ф-я } (\tau\gg\frac{1}{\omega_{km}})} = -\underset{V_{km}(\infty)=\langle\psi_k|H_I|\psi_m\rangle}{\underset{\parallel}{V_{km}(t)}}\frac{e^{i\omega_{km}t}}{\hbar\omega_{km}}\Big|_{t\to\infty}$$

$$C_k(t)\Big|_{t\to\infty} = -\frac{1}{\hbar\omega_{km}}V_{km}e^{i\omega_{km}t}.$$

$$|\psi_D^{(1)}\rangle = |\psi_n\rangle + \sum_{k\neq n}\frac{1}{-\hbar\omega_{kn}}V_{kn}e^{i\omega_{kn}t}|\psi_k\rangle$$

Что озн. эта запись? Понять это можно, перейдя в пш.

$$|\psi_{\text{ш}}(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}|\psi_D(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_nt}|\psi_n\rangle + \sum_{k\neq n}\frac{1}{E_n-E_k}V_{kn}\cancel{e^{\frac{i}{\hbar}E_kt}}e^{-\frac{i}{\hbar}E_nt}\cdot\cancel{e^{-\frac{i}{\hbar}E_kt}}|\psi_k\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_nt}\underbrace{\left[|\psi_n\rangle + \sum_{k\neq n}\frac{\langle\psi_k|H_I|\psi_n\rangle}{E_n-E_k}|\psi_k\rangle\right]}_{|\psi_n'\rangle}$$

← одно и тоже

$$e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}|\psi_D(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n't}|\psi_n'\rangle = |\psi_{\text{ш}}(t)\rangle$$

$\boxed{!}$ При адиаб. переходах переходов не происходит.

Лекция 17

21 ноября

$\boxed{II}$ Периодическое возмущение

Пусть $\hat{H}_I(t) = \hat{H}_I e^{-i\Omega t} \underbrace{[+ \hat{H}_I^+ e^{i\Omega t}]}_{\text{не играет роли}}$ Задача сводится на поиск ? T_n

$$C_n^{(t)} = \int_{-\infty}^{t} \frac{1}{i\hbar} e^{i\omega_{mn} t} V_{mn}(t) dt, \text{ где } V_{mn}(t) = \langle \psi_m | \hat{H}_I(t) | \psi_n \rangle = \underbrace{\langle \psi_m | \hat{H}_I | \psi_n \rangle}_{\text{обозн. } V_{mn}} e^{-i\Omega t}$$

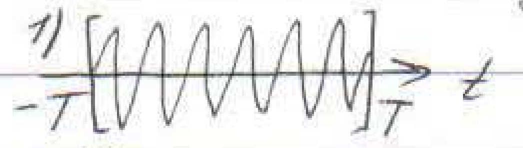
$$C_n(t) = \int_{-\infty}^{t} \frac{1}{i\hbar} e^{i(\omega_{mn} - \Omega)t} V_{mn} dt$$

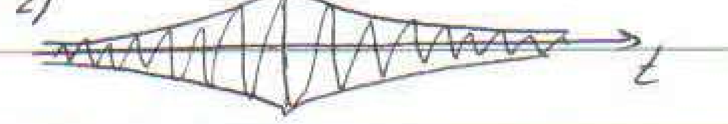
Если $\omega_{mn} \neq \Omega$, то перехода за конечное или бесконечное время не произойдет.

Если $\omega_{mn} = \Omega$, то время перехода ∞.

Есть 2 пути: 1) интегрировать в $[-T; T]$, где T большое, но конечное

2) умножить на $e^{-\varepsilon|t|}$, где $\varepsilon|t|$ обеспечивает сх-ть $(\varepsilon \to 0)$





Обозначим $\Delta = \omega_{mn} - \Omega$

1) $C_n(t) = \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{i\Delta} [e^{i\Delta T} - e^{-i\Delta T}] V_{mn} = -\frac{1}{\Delta\hbar} 2i \sin(\Delta T) V_{mn}$. $\left(\begin{smallmatrix} \Delta \to 0 \\ T \to \infty \end{smallmatrix}\right)$

$$P_n = |C_n|^2 = \frac{1}{\hbar^2 \Delta^2} 4 \sin^2(T\Delta) |V_{mn}|^2 \sim T^2 \quad \left(\begin{smallmatrix} \Delta \to 0 \\ T \to \infty \end{smallmatrix}\right)$$

Скорость перехода $\gamma_{mn} \equiv \frac{P_n}{2T} = \frac{1}{\hbar^2 \Delta^2} \frac{2 \sin^2(T\Delta)}{T} |V_{mn}|^2 \sim T \sim \delta(0)$

Полученные выражения имеют смысл, когда $|C_n| < 1$. Имеет место иерархия бесконечностей

$$\frac{1}{\hbar} [|V_{mn}| T] \ll 1, \quad \Delta T \ll 1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\Delta t} dt = 2\pi\delta(\Delta); \quad \int_{-\infty}^{\infty} e^{i 0 t} dt = 2\pi\delta(0); \quad \int_{-T}^{T} e^{i0t} dt = 2T$$

Поэтому $T \leftrightarrow \pi\delta(0)$, $T \to +\infty$.

$$\left.\frac{\sin^2(\Delta \cdot T)}{\Delta^2 \cdot T}\right|_{T \to \infty} = \begin{cases} 0, & \Delta \neq 0 \\ \infty, & \Delta = 0 \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\Delta \frac{\sin^2(T\Delta)}{T\Delta^2} \cdot 1 = \int_{-\infty}^{\infty} d\Delta \frac{\sin^2(T\Delta)}{(T\Delta)^2} \cdot T = |\Delta \cdot T \equiv x| = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\sin^2 x}{x^2} = \overset{\text{через вычеты}}{\lim_{\varepsilon \to 0} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2 + \varepsilon^2} dx}_{= \pi}} =$$

$$\gamma_{mn} = \frac{1}{\hbar^2} 2\pi\delta(\Delta)|V_{mn}|^2 = \frac{1}{\hbar^2} 2\pi\, \delta(\omega_{mn} - \Omega)|V_{mn}|^2 = \frac{1}{\hbar} 2\pi\delta(\hbar\omega_{mn} - \hbar\Omega)|V_{mn}|^2$$

$$\boxed{\gamma_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{mn}|^2 \delta(E_m - E_n - \hbar\Omega)}$$

$$\boxed{\frac{1}{\tau_n} = \sum_m \gamma_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar}\sum_m |\langle\psi_m|\hat{H}_I|\psi_n\rangle|^2 \delta(E_m - E_n - \hbar\Omega)}$$

Золотое правило Ферми (в более общем случае)

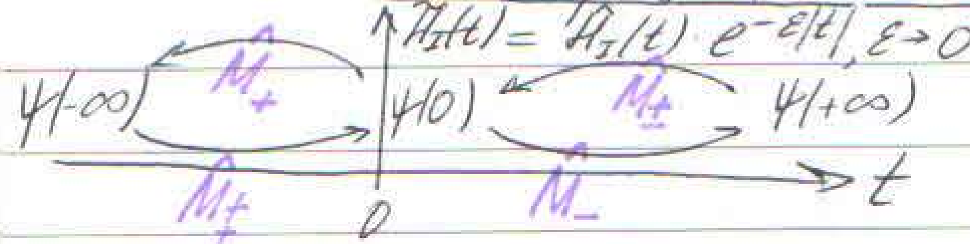
Выражение имеет смысл, когда сумма заменяется на интеграл и если E_m - уровень непр. спектра, m - непр. индекс, а E_n - либо дискретный, либо непрерывный.

Вообще говоря, поскольку $\hat{H}_I(t)$ эрмитов, то

$$\frac{1}{\tau_n} = \frac{2\pi}{\hbar}\sum_m |\langle\psi_m|\hat{H}_I|\psi_n\rangle|^2 \left(\delta(E_m - E_n - \hbar\Omega) + \delta(E_m - E_n + \hbar\Omega)\right)$$

S-матрица, T-матрица, опт. теорема

$\hat{H}_I(t) = \hat{H}_I(t)\, e^{-\varepsilon|t|},\ \varepsilon \to 0$



Задача рассеяния: рас. потенциал локализован; сначала налетающий ВП не видит его, а потом, в самом конце, ВП тоже не видит его

$$\psi_D(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\psi_{ш}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\psi_{ш}(0)$$

При $t \to -\infty$ $\hat{H}_0 \equiv \hat{H}$, тогда $\psi_D(t)|_{t\to-\infty} \to const$

Аналогично, $t \to +\infty \Rightarrow \hat{H}_0 \equiv \hat{H}$, тогда $\psi_D(t)|_{t\to+\infty} \to const$

Далее будем считать, что H_I не зависит от t.

Если $\psi_{ш} \in$ непр. спектру, то $\exists \lim\limits_{t\to\pm\infty} \psi_D(t) = const$ (предел слабый), даже если не предполагать наличие множителя $\exp(-\varepsilon(t))$

Обозначим: $e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\Big|_{t\to-\infty} = \hat{M}_+$

$e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\Big|_{t\to+\infty} = \hat{M}_-$

Мёллеровские операторы

($\hat{M}_+$ и $\hat{M}_-$ сохраняют норму и скал. произведение, но они определены только на непр. спектре $\Rightarrow$ они не унитарные)

$\hat M_- \psi(0) = \psi(+\infty)$ $\qquad$ $\hat M_+ \psi(0) = \psi(-\infty)$

$\hat M_-^+ \psi(+\infty) = \psi(0)$ $\qquad$ $\hat M_+^- \psi(-\infty) = \psi(0)$

<u>S-матрица</u>: $\hat S \psi(+\infty) = \psi(-\infty) \Rightarrow \boxed{\hat S = \hat M_+ \hat M_-^+}$

$\hat S^+ \hat S = 1$, $\hat S$ - унитарная

$\psi(\pm\infty)$ - живет на асимптотически больших временах $\Rightarrow$ на асимптотически больших расстояниях, т.к. движение свободное.

Получим явное выражение для $\hat M_-, \hat M_+, \hat S$.

$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi_D(t)> = \hat H_D(t)|\psi_D(t)>$

Интегрируем: $|\psi_D(t)> = |\psi_D(0)> + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t e^{\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t}\hat H_{I\omega} e^{-\varepsilon|t|} \cancel{e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t}\cdot e^{\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t}}\cdot$
$\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H t}|\psi(0)>dt$

Предположим, что $|\psi(0)>$ - точное решение СУШ с $\hat H = \hat H_0 + \hat H_I$ - без следов $e^{-\varepsilon|t|}$, соотв. энергии E.

$$|\psi_D(t)> = |\psi(0)> + \int_0^t \frac{dt}{i\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t} e^{-\varepsilon|t|} \hat H_{I\omega} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H t}|\psi(0)>$$

Пусть $t>0$, тогда $|\psi_D(t)> = |\psi(0)> + \int_0^t \frac{dt}{i\hbar} e^{t(\frac{i}{\hbar}\hat H_0 - \varepsilon - \frac{i}{\hbar}E)}\hat H_{I\omega}|\psi(0)>\Big|_{t\to+\infty} =$

$$= |\psi(0)> + \frac{1}{i\hbar}\frac{1}{\varepsilon - \frac{i}{\hbar}\hat H_0 + \frac{i}{\hbar}E}\hat H_{I\omega}|\psi(0)>$$

$$|\psi_D(+\infty)> = |\psi(0)> - \frac{1}{E - \hat H_0 \ominus i\varepsilon}\hat H_{I\omega}|\psi(0)>$$

Пусть $t<0$, тогда $|\psi_D(-\infty)> = |\psi(0)> - \frac{1}{E\hat H_0 \oplus i\varepsilon}\hat H_{I\omega}|\psi(0)>$

$$\boxed{\begin{aligned} \hat M_- &= 1 - \frac{1}{E - \hat H_0 - i\varepsilon}\hat H_{I\omega} \\ \hat M_+ &= 1 - \frac{1}{E - \hat H_0 + i\varepsilon}\hat H_{I\omega} \end{aligned}}$$

$$\underline{|\psi(0)> = |\psi(-\infty)> + \frac{1}{E - \hat H_0 + i\varepsilon}H_{I\omega}|\psi(0)>}$$

<u>Зам.</u> Ур-е Липпмана-Швингера; $\psi(x) = e^{ik\vec x} + \int G_0(\vec x, \vec y)\frac{2m}{\hbar^2}V(\vec y)\psi(\vec y)d\vec y$

Лекция 18

25 ноября

$$|\psi(-\infty)\rangle = |\psi(0)\rangle - \frac{1}{E-H_0+i\varepsilon} H_I|\psi(0)\rangle$$

$$|\psi(+\infty)\rangle = |\psi(0)\rangle - \frac{1}{E-H_0-i\varepsilon} H_I|\psi(0)\rangle$$

Борновский ряд:

$$|\psi(0)\rangle = |\psi(-\infty)\rangle + \frac{1}{E-H_0+i\varepsilon} H_I|\psi(0)\rangle = |\psi(-\infty)\rangle + G_0(E)H_I|\psi(-\infty)\rangle +$$
$$+ G_0(E)H_I G_0(E)H_I|\psi(-\infty)\rangle + \ldots = |\psi(-\infty)\rangle + \underbrace{(G_0 + G_0H_IG_0 + G_0H_IG_0H_IG_0 + \ldots)}_{G(E)} H_I|\psi(-\infty)\rangle,$$

где $G(E) = \frac{1}{E-H_0-H_I+i\varepsilon}$

Соберем иначе:

$$|\psi(0)\rangle = |\psi(-\infty)\rangle + G_0(\underbrace{H_I + H_IG_0H_I + H_IG_0H_IG_0H_I + \ldots}_{\text{называют } T})|\psi(-\infty)\rangle =$$
$$= |\psi(-\infty)\rangle + G_0T|\psi(-\infty)\rangle$$

Теперь можно заменять $H_I|\psi(0)\rangle = T|\psi(-\infty)\rangle$

↖ беск. оператор

$$\Rightarrow |\psi(-\infty)\rangle = |\psi(0)\rangle - \frac{1}{E-H_0+i\varepsilon} T|\psi(-\infty)\rangle$$

$$|\psi(+\infty)\rangle = |\psi(0)\rangle - \frac{1}{E-H_0-i\varepsilon} T|\psi(-\infty)\rangle$$

$$\frac{1}{x-i\varepsilon} = V.p.\frac{1}{x} + i\pi\delta(x); \quad \frac{1}{x+i\varepsilon} = V.p.\frac{1}{x} - i\pi\delta(x)$$

Осталось избавиться от $|\psi(0)\rangle$ ⇒ вычитаем, исп. формулы через главные значения.

$$|\psi(-\infty)\rangle - |\psi(+\infty)\rangle = 2\pi i\,\delta(E-H_0)\,T|\psi(-\infty)\rangle$$

$$|\psi(+\infty)\rangle = |\psi(-\infty)\rangle - 2\pi i\,\delta(E-H_0)\,T|\psi(-\infty)\rangle = S^+|\psi(-\infty)\rangle$$

Так мы избавились от Мел. операторов.

Перевернём задачу. Пусть изв. $|\psi(-\infty)\rangle = |\psi_a\rangle$.

$\times\langle\psi_b|$, тогда

$$\underset{\delta_{ab}}{\underset{\|}{\langle\psi_b|\psi_a\rangle}} - 2\pi i\langle\psi_b|\delta(E-H_0)T|\psi_a\rangle = \langle\psi_b|\psi(+\infty)\rangle = \langle\psi_b|S^+|\psi_a\rangle = (S^+)_{ba}$$

↖ матричный эл-т.

Откуда вообще взялись дроби с зн. $E-H_0$?

$$e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\psi(0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}|\psi(0)\rangle \qquad \Big(\overbrace{(H_0+H_I)}^{H}|\psi(0)\rangle = E|\psi(0)\rangle\Big)$$

$E \leftrightarrow H$ (зн. соотв. H, с СЗ E)

$$|\psi(-\infty)\rangle = |\psi(0)\rangle - \frac{1}{E-H_0+i\varepsilon}H_I|\psi(0)\rangle \;\Big|\times(E-H_0+i\varepsilon)$$

$$(E-H_0)|\psi(-\infty)\rangle = (E-H_0)|\psi(0)\rangle - H_I|\psi(0)\rangle = 0$$

$\Downarrow$

E − СЗ гамильтониана H_0 с СФ $|\psi(-\infty)\rangle$

Т.е. сист. оказ. консервативной!

$$\langle\psi_b|\delta(E-H_0)T|\psi_a\rangle = \langle\psi_b|\delta(E-E_b)T|\psi_a\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{(S^+)_{ab} = \delta_{ab} - 2\pi i\,\delta(E-E_b)T_{ba}}$$

$(H_0|\psi_b^a\rangle = E_b^a|\psi_b^a\rangle)$

Хочется убрать E, т.к. $E \leftrightarrow |\psi(0)\rangle$, но $E = E_a = E_b \Rightarrow \delta(E-E_b) = \delta(0)$

$$P_{a\to b} = 4\pi^2\delta(E_a-E_b)\delta(E_a-E_b)\cdot|T_{ba}|^2 \sim T^2 \leftarrow \text{квадрат времени}$$

Аналогично рез-ам прошлой лекции $\int_{-T}^{T}1\cdot dt = 2T = 2\pi\hbar\delta(0)$

Для скорости перехода:

$$V_{ab} = P_{a\to b}/2T = \frac{2\pi}{\hbar}\delta(E_a-E_b|T_{ba}|^2$$

Действует закон сохр. вер-ти $\Rightarrow \frac{1}{\tau_a} = \frac{\Gamma_a}{\hbar} = \sum_b V_{ab} = \frac{2\pi}{\hbar}\sum_b|\langle\psi_b|T|\psi_a\rangle|^2\delta(E_a-E_b)$

⇒ т.к. $T = H_I + \overbrace{H_I G_0 H_I}^{1} + \overset{2\ldots}{\ldots}$, то в 1ом прибл. получим Золотое правило Ферми (уже в 3ий раз)

Переходим к опт. теореме (вытекает из того, что S − унит. матрица)

$$S^+S = 1 \Leftrightarrow \sum_c (S^+)_{ac}(S)_{cb} = \delta_{ab}$$

$$S_{cb} = (S^+)^*_{bc} \Rightarrow S_{cb} = \delta_{bc} + 2\pi i\,\delta(E_b-E_c)T^*_{bc}$$

$$(S^+)_{ac} = \delta_{ac} - 2\pi i\,\delta(E_a - E_c)\,T_{ac}$$

$$\Rightarrow \sum_c' \left(\delta_{ac} - 2\pi i\,\delta(E_a - E_c)T_{ac}\right)\cdot\left(\delta_{bc} + 2\pi i\,\delta(E_b - E_c)\cdot T^*_{bc}\right) = \delta_{ab}$$

$$\delta_{ab} = \delta_{ab} + 2\pi i\,\delta(E_b - E_a)T^*_{ba} - 2\pi i\,\delta(E_a - E_b)\cdot T_{ab} + 4\pi^2\sum_c \delta(E_a - E_c)\cdot$$
$$\cdot\,\delta(E_b - E_c)\,T_{ac}\cdot T^*_{bc} \Rightarrow$$

$$i\delta(E_b - E_a)T^*_{ba} - i\delta(E_a - E_b)\cdot T_{ab} + 2\pi\sum_c \delta(E_a - \overset{\overset{\delta}{\nearrow}}{E_c})\,\delta(E_b - E_c)\cdot$$
$$\cdot\,T_{ac}\cdot T^*_{bc} = 0$$

$$i\,(T^*_{ba} - T_{ab}) + 2\pi\sum_c \delta(E_b - E_c)\cdot T_{ac}\cdot T^*_{bc} = 0$$

Пусть $b = a$, тогда

$$iT^*_{aa} - iT_{aa} + 2\pi\sum_c T_{ac}T^*_{ac}\,\delta(E_a - E_c) = 0$$

$$\boxed{\underbrace{i\,(T^*_{aa} - T_{aa})}_{2\mathrm{Im}\,T_{aa}} + \underbrace{2\pi\sum_c |T_{ac}|^2\,\delta(E_a - E_c)}_{\Gamma_a} = 0} \leftarrow \text{опт. теорема}$$

$$\boxed{2\mathrm{Im}\,T_{aa} + \Gamma_a = 0}$$

Вторичное квантование

Зачем?

1. Необх. для опис. процессов с измен. числом частиц
2. Необх. для опис. сост. с неопред. числом частиц

Пусть есть 1 част., для нее гильб. пр-во, в нем базис $|n\rangle$, конкретнее $\psi_n(x)$ (коорд. предст.) (чаще берут именно коорд. предст.)
Будем считать, что $H\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$ (иногда это оказ. удобнее)

Каждому базисному вектору ставим в соотв. два оператора:

$\hat{a}_n$ — опер. уничтожения, а $\hat{a}_n^+$ — опер. рождения

Постулируется, что 1) в случае бозонов

$$[a_n, a_m] = 0 \Rightarrow [a_n^+, a_m^+] = 0$$
$$а\ [a_n, a_m^+] = \delta_{nm}$$

2) в случае фермионов $[a_n, a_m]_+ = 0 \Rightarrow [a_n^+, a_m^+]_+ = 0$

$[a_n, a_m^+]_+ = \delta_{nm}$

где $[\hat{A}, \hat{B}]_+ = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ – антикоммутатор