Симаев

Лекция 1

10.02.04

Формула Бальмера

Комбинационный принцип Ритца

частоты в водороде

$$\omega_{mn} = R\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right)$$

это частный случай

$$\omega_{nm} = \omega_{nk} + \omega_{km}$$

интенсивность I_{nm}

* 1925г. – Гейзенберг предположил, что неверна классич. механика, а верна классич. электродин

частота излучения определяется частотой колебания диполя, а I определяется амплитудой колебаний

дипольный момент x – матрица

$$x_{nm} \sim e^{i\omega_{nm}t}$$

$\Rightarrow$ в атоме у электрона нет $x(t)$ (т.е. траектории)

$\Rightarrow$ к классич. механике никакого отнош. атом не имеет

Но в камере Вильсона, электронно-лучевой трубке (ЭЛТ) $\exists\, x(t) \Rightarrow \exists\, v(t), p(t)$

ск-ть импульс

иллюстрация — микроскоп Гейзенберга
если ∃ траектория, то ∃ точно опред.

$e \cdot x(t+\Delta t)$ к-ты в t и $t+\Delta t$
их опред., облучая светом λ

$e \cdot x(t)$

$\Delta x \sim \lambda$
неопред-ть

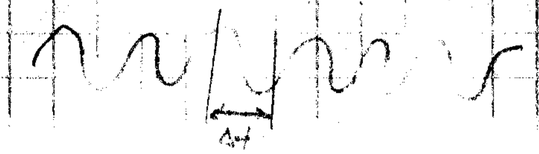
свет рассеялся ⇒ электрон испытал отдачу

$\Delta p \sim p_{фотона} \sim \frac{\hbar}{\lambda}$

тогда $\Delta x \cdot \Delta p \sim \hbar$

⇒ в атоме $\Delta x \sim x$
$\Delta p \sim p$
а в ЭЛТ $x \cdot p \gg \hbar$

аналогия — сигнал $f(t)$



$\omega(t)$ опр. с погрешностью во времени Δt

$\Delta t = \frac{2\pi}{\omega}$

* 1928 г. — Томпсон

ЭЛТ

наклад. внеш. поле
если пятно
на экране расплыв.,
то неопред. импульса ∃
Поместил кристалл

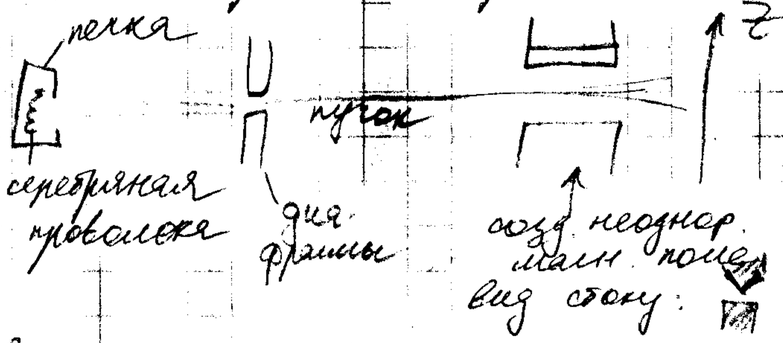
Из за дифракции на кристалле
∃ появл. и дополнит. max

центр. пятно

* одночастичная дифракция
показала, что у эл-на ∃ волн. св-ва
Электроны попадали как в центр. пятно так и в первые максимумы

⇒ в природе ∃ индетерминизм

* Штерна — Герлаха



в зависимости от проекции магн. момента атома пучок расщепится

$F_z \sim \mu_z \frac{\partial H_z}{\partial z}$ в атоме серебра магн. момент создается спином

в опыте измер. проекция спина на ось z

если по классике: должна получится на экране полоска

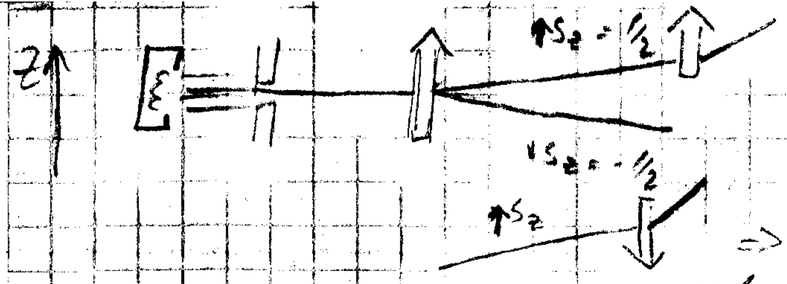
в опыте: 2 пятна
это док-во ∃ спина 1/2

док-во того, что не ∀ квантовомех. состояние — волн ф-ия

меняем направление поля и градиента поля

$\vec{n}$ измер. $S_n = \vec{n} \cdot \vec{S}$
проекция спина на направление $\vec{n}$

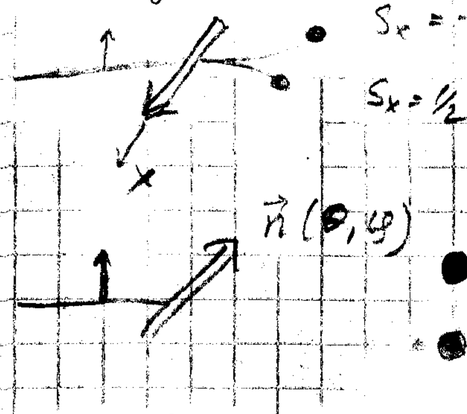
все равно получили 2 пятна одинак. интенсивности



$\Rightarrow S_{-z} = -1/2$

т.к. мы можем одновременно измерить S_z и S_{-z}, они имеют точно опред. значение,

2 такие величины можно назвать совместимыми или совместными наблюдаемыми



$\Rightarrow$ индетерминизм

$I \sim \frac{1+\cos\theta}{2}$

$I \sim \frac{1-\cos\theta}{2}$

теория hidden variables (скрытые параметры)

идея: у спина ↑ на самом деле есть опред. ориентация по оси x ($+1/2$) и по оси y ($-1/2$)

$S_{-z} = +1/2 \quad S_{-y} = +1/2 \quad S_{-x} = -1/2$

и оси n

$S_n = +1/2$ тогда $S_{-n} = -1/2$

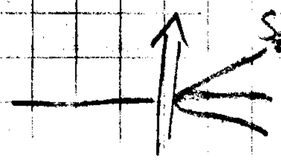
просто мы S_x и S_y не знаем

1928 - теорема фон Неймана

$\langle A+B \rangle \neq \langle A \rangle + \langle B \rangle$

она противоречит теории

другое у-во: в 60-е годы была создана система $S = 1$ спин



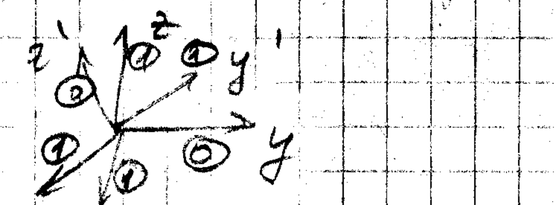
оказывается у $S = 1$ можно померить S_x^2, S_y^2, S_z^2

каждая м.б. равна 0 или +1

$S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = 2$

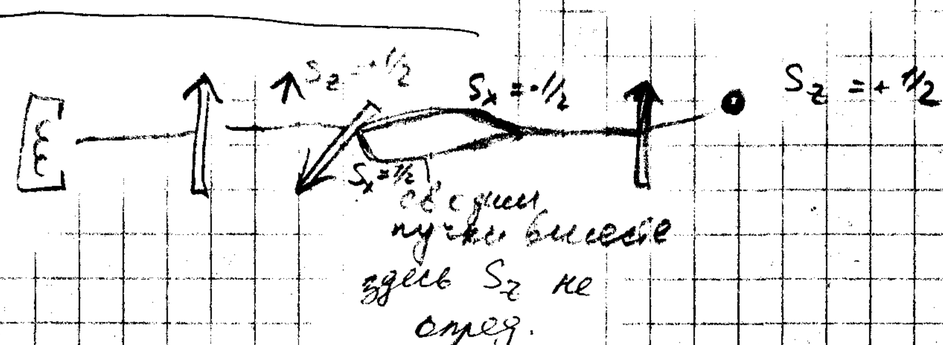
S_x^2	S_y^2	S_z^2
1	1	0
1	0	1
0	1	1

например



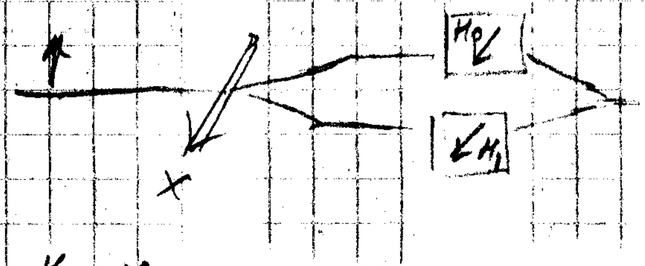
т.о. по теореме стереометрии $\exists$ направления в которых 0, 0, 1

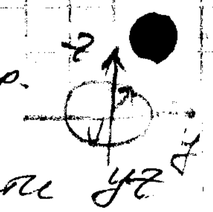
$\Rightarrow$ для этой сист. нельзя ввести скрытые параметры



$\Rightarrow$ справедлив принцип суперпозиции

состояние со спином 1 – суперпозиц. сост. со спином $S_x = 1/2$ и $S_x = -1/2$





результир. спин вращ. в плоскости yz

зав-т от соотнош. H_0 и H_1

H_0, H_1 – пост. магн. поле, ориентир. по Ox

Если поля направлен в противоп. стороны S_x пучков не изм.

⇒ суперпозиция в равных пропорциях

$$|\psi\rangle = C_1 |x_+\rangle + C_2 |x_-\rangle$$

$|\psi\rangle$ – сост. в к-ом спин ориентирован по оси y

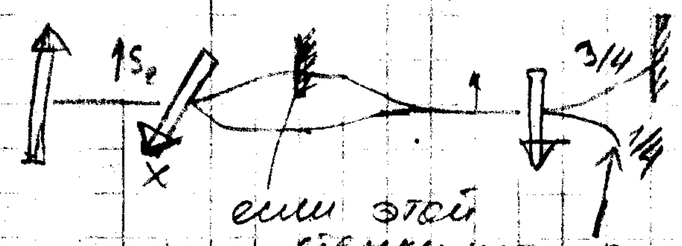
$|x_+\rangle$ – вдоль Ox

$|x_-\rangle$ – противоп. Ox

C_1, C_2 – комплексные

Если $H_1 = -H_0$ то спин ориент. вдоль оси z

⇒ ~~фаза~~ важна относит. фаза C_1 и C_2, а не абсолютная



если этой стенки нет, то ничего не летит

Математическое введение в квантовую механику

$|\psi\rangle$

вектора гильбертова пространства

+ вектор опис. какое-то сост. квантовомех. сист., но не наоборот!

$\langle \chi | \psi \rangle$ – скалир. произвед.

$\langle \chi | \psi \rangle = \langle \psi | \chi \rangle^*$

матрица $\Leftrightarrow$ оператор

$|\xi\rangle = \hat{A} |\psi\rangle$ • на вектор $|\chi\rangle$

$\langle \chi | \xi \rangle = \langle \chi | (\hat{A} |\psi\rangle)$

$\langle \chi | \xi \rangle = \langle \chi | \hat{A} | \psi \rangle$

матричный элемент $\hat{A}$ м/у состояниями χ и ψ

$|\psi\rangle = C_1 |\psi_1\rangle + C_2 |\psi_2\rangle$

тогда $\langle \chi | \psi \rangle = C_1 \langle \chi | \psi_1 \rangle + C_2 \langle \chi | \psi_2 \rangle$

$\langle \psi | \chi \rangle = \langle \psi_1 | \chi \rangle C_1^* + \langle \psi_2 | \chi \rangle C_2^*$

$\langle \psi |$ – „бра" $|\psi\rangle$ – „кет"

$\langle \psi | = C_1^* \langle \psi_1 | + C_2^* \langle \psi_2 |$

$\hat{B} = |\chi\rangle\langle\psi|$ – оператор!

$\hat{B} |\xi\rangle = |\chi\rangle \cdot \langle \chi | \xi \rangle$

11.02.04

Лекция 2

Базис

$|n\rangle$ $\quad n = \begin{cases} 1, 2, \dots, N \\ 1, 2, \dots \end{cases}$

$|n_\alpha\rangle$ – α-базис

базис:
- ортонормированный

$\langle n|m\rangle = \delta_{mn}$

- полный
  - для конечномерного пр-ва очевидно выполняется

$\forall \psi: \quad |\psi\rangle = \sum\limits_n \psi_n |n\rangle,$

где: $\psi_n = \langle n|\psi\rangle \in \langle\psi|n\rangle$

$|\psi\rangle = \sum\limits_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle =$

$= \left[\sum\limits_n |n\rangle\langle n|\right] |\psi\rangle$

единичный оператор

$\hat{E} = \sum\limits_n |n\rangle\langle n|$

$\sum$ м.б. и конечна, и ∞

например

$\hat{A} + 7\hat{E} = \hat{A} + 7$ подразумевается единичную матрицу

$\langle\chi|\psi\rangle = \langle\chi|\hat{E}|\psi\rangle =$

$= \sum\limits_n \underbrace{\langle\chi|n\rangle}_{\chi_n^*} \underbrace{\langle n|\psi\rangle}_{\psi_n} \equiv \sum\limits_n \chi_n^* \psi_n$

$\langle\chi|A|\psi\rangle = \sum\limits_{n,m} \langle\chi|\underbrace{n\rangle}_{\hat{E}} \underbrace{\langle n|A|m\rangle}_{A_{nm}} \underbrace{\langle m|}_{\hat{E}}\psi\rangle$

$= \sum\limits_{n,m} \chi_n^* \cdot A_{nm} \cdot \psi_m$

$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$ до ∞ или N

$\langle\chi| = (\chi_1^*, \chi_2^*, \dots)$

$\hat{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \\ \vdots & & \end{pmatrix}$

чтобы получить из правой скобки левую надо транспонировать и комплексно сопрячь, вместе это наз. эрмитово сопряжение $\dagger$

1) $\left(\hat{A}^\dagger\right)_{nm} = \hat{A}^*_{mn}$
2) $\left(\hat{A}^\dagger\right)^\dagger = \hat{A}$
3) $\left(a\hat{A} + b\hat{B}\right)^\dagger = a^* A^\dagger + b^* B^\dagger$
4) $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$
5) $\left(|\psi\rangle\right)^\dagger = \langle\psi|, \quad \left(\langle\psi|\right)^\dagger = |\psi\rangle$

6) $(a)^+ = a^*$

число

Следствия:

- $(A|\psi)^* = \langle\psi|A^+$
- $\langle x|A|\psi\rangle^* = \langle x|A|\psi\rangle^+ =$

$= \langle\psi|\hat{A}^+|x\rangle$

Виды операторов:

✱ эрмитов $A^+ = A$

они обладают веществ. спектром ⇒ соответствуют физич. величинам

докажем это:

пусть

$A|\alpha\rangle = a|\alpha\rangle$

$\langle\alpha|A|\alpha\rangle = a\langle\alpha|\alpha\rangle$

$a = \dfrac{\langle\alpha|A|\alpha\rangle}{\langle\alpha|\alpha\rangle}$ — диагон. матричный эл-т

$a^* = \dfrac{\langle\alpha|A|\alpha\rangle^*}{\langle\alpha|\alpha\rangle^*} =$

$= \dfrac{\langle\alpha|A^+|\alpha\rangle}{\langle\alpha|\alpha\rangle} = \dfrac{\langle\alpha|A|\alpha\rangle}{\langle\alpha|\alpha\rangle} = a$

⇒ a вещественное.

Теорема 1:

соб. в-ра с разными соб. значениями эрм. оператора ортогональны

$\langle\alpha_n|A|\alpha_m\rangle$ — матричный элемент

соб. в-ры с разн. соб. знач.

$A|\alpha_n\rangle = a_n|\alpha_n\rangle$ — эрмитово сопряжаем

$A|\alpha_m\rangle = a_m|\alpha_m\rangle$ $\quad a_n \neq a_m$

$\langle\alpha_n|A^+ = a_n^*\langle\alpha_n|$

⇓ в силу эрмитовости A

$\langle\alpha_n|A = a_n\langle\alpha_n|$!

$\langle\alpha_n|A|\alpha_m\rangle = a_m\langle\alpha_n|\alpha_m\rangle$ — (1)

$\langle\alpha_n|A|\alpha_m\rangle = a_n\langle\alpha_n|\alpha_m\rangle$

$\Rightarrow (a_m - a_n)\langle\alpha_n|\alpha_m\rangle = 0$

⇓

$\langle\alpha_n|\alpha_m\rangle = 0$

Следствие

оператор с дискретным невырожд. спектром порождает полную ортонормированную систему (базис) единственным образом (это набор его собств. векторов)

Д-во:

невырожд. спектр ⇒ все соб. знач. разные ⇒

⇒ все соб. в-ра ортогональны ⇒ базис

Теорема 2

Матрица эрмитова оператора в базисе из соб. векторов явл. диагональной

Если в каком-то базисе матрица эрм. оп. имеет диаг. вид, то базис – соб. в-ра

в этом базисе $|\alpha_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}$

$|\alpha_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \end{pmatrix}$

Теорема 3

Если эрм. оператор $\hat{A}$ имеет дискретный невырожд. спектр, а $\hat{B}$ - эрмитов. Тогда $\exists$ общие сов. вектора тогда и только тогда, когда $[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$

коммутатор

1) Возьмем базис $|\alpha_n\rangle$ сов. векторов оператора $\hat{A}$

в нем

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} a_1 & & 0 \\ & a_2 & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix}$$

т.к. у них общие сов. в-ра, то $\hat{B} = \begin{pmatrix} b_1 & & 0 \\ & b_2 & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix}$

$$\hat{A}\hat{B} = \begin{pmatrix} a_1 b_1 & & 0 \\ & a_2 b_2 & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix} = \hat{B}\hat{A}$$

$\Rightarrow \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$

2) возьмем тот же базис различные матричные эл-ты нулевого оператора

$$0 = \langle \alpha_n | [A;B] | \alpha_m \rangle =$$

$$= \langle \alpha_n | \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} | \alpha_m \rangle =$$

$$= a_n \langle \alpha_n | B | \alpha_m \rangle - a_m \langle \alpha_n | B | \alpha_m \rangle =$$

$$= (a_n - a_m) \cdot \langle \alpha_n | B | \alpha_m \rangle \Rightarrow \hat{B}$$ диагональна в $\{\alpha_n\}$ - сов. в-ра $\hat{B}$

Теорема 4

Если $[\hat{A},\hat{B}] = 0$, $[\hat{A};\hat{C}] = 0$,

а $[\hat{B};\hat{C}] \neq 0$ ($\hat{A},\hat{B},\hat{C}$ - эрм. оп.),

то спектр $\hat{A}$ вырожден

Д-во: пусть спектр $\hat{A}$ невырожд, тогда у $\hat{B}$ и $\hat{C}$ такие же сов. в-ра как у $\hat{A}$ $\Rightarrow$ $\hat{B}$ и $\hat{C}$ диагон. $\Rightarrow [\hat{B};\hat{C}] = 0$, что противор. усл.

✱ Проекционные операторы

1) $P^+ = P$

2) $P^2 = P$

P - проектор

оператор вырожд эрмитов, но спектр м.б. вырожден

при №3 вырожден всегда

Пусть $a_1 = a_2$, а ост. разные

$|\alpha_1\rangle$ (=) $|\alpha_1\rangle$

$|\alpha_2\rangle$

построим базис

$|\alpha_3\rangle$; $|\alpha_4\rangle$ ... до ∞ или N

не хватает 2х базисных векторов

1-й возьмем $|\alpha_1\rangle$

построим $|\tilde{\alpha}_2\rangle$: он будет ортогонален $|\alpha_1\rangle$ как лин. комбинация $|\alpha_1\rangle$ и $|\alpha_2\rangle$

$\Rightarrow$ при вырожд. спектре базис построить можно, но неоднозначно, можно повернуть, например,

$$|\alpha_1'\rangle = |\alpha_1\rangle \cos\varphi + |\tilde{\alpha}_2\rangle \sin\varphi$$

$$|\alpha_2'\rangle = -|\alpha_1\rangle \sin\varphi + |\tilde{\alpha}_2\rangle \cos\varphi$$

возьмем базис $|\pi_n\rangle$ из соб. векторов

$$\hat{P}|\pi_n\rangle = p_n|\pi_n\rangle$$

в этом базисе

$$\hat{P} = \begin{pmatrix} p_1 & & \\ & p_2 & \\ & & \ddots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_1^2 & & \\ & p_2^2 & \\ & & \ddots \end{pmatrix} = \hat{P}^2$$

$\Rightarrow$ собств. знач. проекционного оператора удовл. соотнош.!

$$p_k = p_k^2 \Rightarrow p_k = \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases}$$

например,

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ 0 \end{pmatrix}$$ – проектирование на плоскость xy

$$\begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & 1 & & 0 & \\ & & 0 & & \\ & 0 & & 1 & \\ & & & & 1 \end{pmatrix} = P_1 + P_2 + P_4 + P_6$$

P_2 – проектирование на 2-ое направление в пространстве

$$P_2 = \begin{pmatrix} 0 & & \\ & 1 & \\ & & \ddots \end{pmatrix} = |\pi_2\rangle\langle\pi_2|$$

$$(P_2)_{nm} = \langle\pi_n|P_2|\pi_m\rangle = \langle\pi_n|\pi_2\rangle \cdot \langle\pi_2|\pi_n\rangle = \begin{cases} 1 & m=n=2 \\ 0 & \text{в ост. случ.} \end{cases}$$

$\begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix}$ – проектор

$$|\pi_2\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \qquad \langle\pi_2| = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}; \frac{1}{\sqrt{2}}\right)$$

Функции от операторов

пусть $\hat{A}$ – эрмитов оператор в базисе собств. в-ров

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} a_1 & & \\ & a_2 & \\ & & \ddots \end{pmatrix}$$

$$\hat{A}^n = \begin{pmatrix} a_1^n & & \\ & a_2^n & \\ & & \ddots \end{pmatrix}$$

Опр.

$$f(\hat{A}) = \begin{pmatrix} f(a_1) & & \\ & f(a_2) & \\ & & \ddots \end{pmatrix}$$ – в базисе соб. в-ров

18.02.04 **Лекция 3**

ДНС - дискретный невырожд. спектр

ДНС $\Rightarrow \exists!$ базис

ЭО (эрмитов оператор) $\Rightarrow \infty$ Б

ПО - проект. оператор

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ i/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

$$P_{|\psi\rangle} = |\psi\rangle\langle\psi| = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{i}{2} \\ \frac{i}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$|\psi\rangle \quad \langle\psi|\psi\rangle = 1$$

Спектральное разложение ЭО

ЭО $\hat{A}$ имеет вещественный спектр

$$A|\alpha_n\rangle = a_n |\alpha_n\rangle$$

тогда в α_n:

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & & \\ & a_2 & 0 \\ & 0 & \ddots \end{pmatrix} =$$

$$= a_1 |\alpha_1\rangle\langle\alpha_1| + a_2 |\alpha_2\rangle\langle\alpha_2| + \ldots$$

$$\Rightarrow A = \sum_n a_n |\alpha_n\rangle\langle\alpha_n| =$$

$$= \sum_n a_n P_n^{(\alpha)}$$

проект. оператор

если спектр невырожд., то это разложение однозначно

спектр $\hat{A}$ - то, что мы получаем при измерении

Опр.: Функцией оператора $\hat{A}$ в базисе соб. векторов наз.

$$f(\hat{A}) = \begin{pmatrix} f(a_1) & & \\ & f(a_2) & 0 \\ & 0 & \ddots \end{pmatrix}$$

оно можно, но чтобы не привязываться его к базису:

$$f(\hat{A}) = \sum_n f(a_n) P_n^{(\alpha)}$$

Предположим, что $\forall a_n \quad f(a_n) =$

$$= f(0) + f'(0) a_n + \frac{f''(0)}{2!} a_n^2 + \ldots$$

$$\hat{A}^2 = \begin{pmatrix} a_1^2 & & \\ & a_2^2 & 0 \\ & 0 & \ddots \end{pmatrix} \Rightarrow \hat{A}^n = \begin{pmatrix} a_1^n & & \\ & a_2^n & 0 \\ & 0 & \ddots \end{pmatrix}$$

тогда получаем

$$f(\hat{A}) = f(0) + \frac{f'(0)}{1!}\hat{A} + \frac{f''(0)}{2!}\hat{A}^2 + \ldots$$

(эта ф-ла справед. тогда и только тогда, когда ряд Тейлора сходится для всего спектра)

эта ф-ла невер., например:

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & x \geq 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}$$

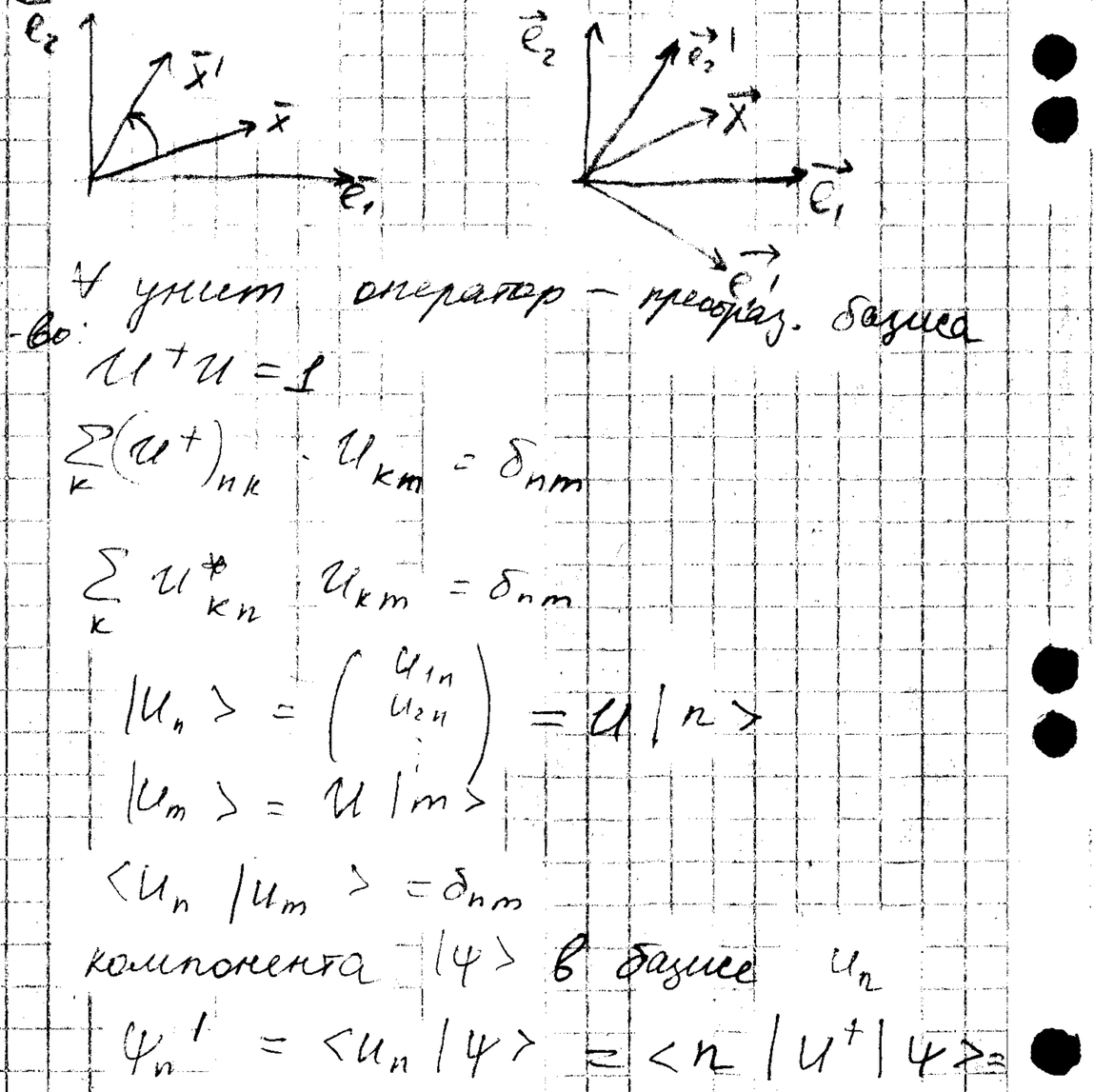
Унитарный оператор

аналог орт. матриц в ком. алгебре

$$U^+ U = 1$$

$x_1' = x_1 \cos\varphi - x_2 \sin\varphi$

$x_2' = x_2 \cos\varphi + x_1 \sin\varphi$ $\Rightarrow$ поворот осей



U унит. оператор – преобраз. базиса

Д-во:

$U^+ U = 1$

$\sum_k (U^+)_{nk} \cdot U_{km} = \delta_{nm}$

$\sum_k U^*_{kn} \cdot U_{km} = \delta_{nm}$

$|U_n\rangle = \begin{pmatrix} U_{1n} \\ U_{2n} \\ \vdots \end{pmatrix} = U|n\rangle$

$|U_m\rangle = U|m\rangle$

$\langle U_n | U_m \rangle = \delta_{nm}$

компонента $|\psi\rangle$ в базисе U_n

$\psi_n' = \langle U_n | \psi \rangle = \langle n | U^+ | \psi \rangle =$

$= \langle n | \psi' \rangle$

ψ' - новый вектор $\langle n | \psi' \rangle$

новый базис получ. применением U,

а новые вектора получ. применением U^+

$A'_{nm} = \langle U_n | A | U_m \rangle =$

$= \langle n | \underbrace{U^+ A U}_{A'} | m \rangle$

$\psi'_n = \sum_k (U^+)_{nk} \psi_k$

$A'_{nm} = \sum_{k,e} (U^+)_{nk} A_{ke} U_{em}$

Опр. выбор того или иного базиса назыв. представлением квант. механике

Если мы работаем в базисе координат – это коорд. ное представление

если в базисе соб. в-ров оператора импульса – импульсное представление

Базисы связаны унитарным преобразованием => разные представления квант. мех. назыв. унитарными эквивалентными.

Рез-т эксперимента не зависит от выбора базиса, все представления равноправны

$\langle x' | \psi' \rangle = \langle x | U \cdot U^+ | \psi \rangle =$

$= \langle x | \psi \rangle$ => скалярное произвед. не зав. от базиса

матричный элемент произв. оператора

$$\langle \chi' | A' \psi' \rangle = \langle \chi | \overbrace{U U^+}^{E} A \overbrace{U U^+}^{E} | \psi \rangle =$$

$$= \langle \chi | A | \psi \rangle \Rightarrow$$ не зав. от базиса

Если

$$A|\alpha\rangle = a|\alpha\rangle$$

$$\underbrace{U^+ A U}_{A'} \underbrace{U^+ |\alpha\rangle}_{|\alpha'\rangle} = a \underbrace{U^+ |\alpha\rangle}_{|\alpha'\rangle}$$

$$A'|\alpha'\rangle = a|\alpha'\rangle$$

$\Rightarrow$ спектр не зависит от унитарного преобразования

Теория измерений

Измеряем S_z, получаем 2 точки спектра $+1/2$ и $-1/2$

Однократное измерение не дает ничего

Если померить S_z ∞ много раз, то в половине случаев $S_z = +1/2$, в половине $S_z = -1/2$ $\Rightarrow \langle S_z \rangle = 0$

$S_z \uparrow$ получим только 1 пятно $\langle S_z \rangle = 1/2$

тогда дисперсия

$$\langle (S_z - \langle S_z \rangle)^2 \rangle \equiv 0$$

$D_{S_z} \equiv 0$

это единственный эксперимент, к-ый приводит к точному рез-ту

Опр. Чистым наз состояние, в котором физ. величина с дискретным невырожд. спектром принимает определенное значение.

1) $\langle \hat{A} \rangle = a$

2) $D_{\hat{A}} \equiv 0$

в таком состоянии $\exists$ вз/однозн. соответствие м/у a и $|\alpha\rangle$

сост, к-ые не явл. чистыми, назыв. смешанными.

а) может получиться, что

$\langle S_z \rangle = 0$ 2 пятна абсолютно не поляриз. сост.

б) $\exists$ выдел. направление в пр-ве

$\vec{n}_0$ $\langle S_{n_0} \rangle = 1/2$ • 1

$D_{S_{n_0}} = 0$ ∘ 0

это наз. чистым сост.

вер-ть

б) $\exists$ $\vec{n}_0$ в котором • max $\frac{1+\xi}{2}$

частично поляризованное состояние ∘ min $\frac{1-\xi}{2}$

Фиксация состояния —

для кажд. оператора с ДНС мы точно знаем $\langle \hat{A} \rangle$ и D_A

Матрица плотности позволяет описать $\forall$ квант.-мех. сост.

фон Нейман выдвинул аксиомы:

1) $\langle a\hat{A} + b\hat{B} \rangle = a\langle \hat{A} \rangle + b\langle \hat{B} \rangle$

2) $\langle 1 \rangle = 1$

3) Среднее наследует свойства того оператора, к-ый усредняется напр., если все $a_i \geq 0$, то $\langle \hat{A} \rangle \geq 0$
если все a_i - веществ. (ЭО),
то $\langle \hat{A} \rangle$ - веществ. число
если спектр чисто мнимый,
то $\langle \hat{A} \rangle$ - чисто мнимое

$$\hat{F} = \hat{E}\hat{F}\hat{E} = \sum_n |n\rangle\langle n| \hat{F} \sum_m |m\rangle\langle m| =$$

$$= \sum_{n,m} |n\rangle\langle m| F_{nm}$$

$$\langle F \rangle = \sum_{n,m} F_{nm} \langle |m\rangle\langle n| \rangle$$

$\langle |n\rangle\langle m| \rangle = \rho_{mn}$, матрица плотности

лирическое отступление
не смотреть матрицу плотности в Ландау-Лифшице
чистые состояния - каркас для конструирования МП
подавляющее число состояний природе - смешанные

квант. компьютер?

C_{13} H

$S = 1/2$ $S = 1/2$

хотелось бы, чтобы эти спины находились в опред. сост.

Для этого поместим их в сильн. магн. поле

$T = 300\,K$ • $1/2 + 2\cdot 10^{-4}$
• $1/2 - 2\cdot 10^{-4}$
вер-ть

$T = 3\,K$ • $1/2 + 2\cdot 10^{-2}$
• $1/2 - 2\cdot 10^{-2}$

$\Rightarrow$ все сост. смешанные

Лекция 4

24.02.04

$$\langle \mathcal{F} \rangle = \sum_{mn} \mathcal{F}_{mn} \rho_{nm}$$

где

$$\rho_{nm} = \langle |m\rangle\langle n| \rangle$$

Выясним свойства матрицы ρ в чистом состоянии

Свойства матрицы плотности

$$\langle \mathcal{F} \rangle = \sum_m \langle m|\hat{F}\hat{\rho}|m\rangle = \mathrm{Tr}\, \mathcal{F}\hat{\rho}$$

сумма диаг. элементов

- $Tr(\underbrace{a}_{\text{числа}}\hat{A} + \underbrace{b}_{\text{числа}}\hat{B}) = a\, Tr\hat{A} + b\, Tr\hat{B}$
- $Tr(A \cdot B \cdot C) = Tr(CAB)$
- Tr инвариантен относит. $\forall$ унитарного преобразования U

$Tr\, A'B' = Tr\, U^+ A \underbrace{(U U^+)}_{E} B U =$

A' — рез-т унит. преобраз. A

из 2 св-ва $= Tr\, U U^+ A B = Tr\, AB$

$\rho'_{mn} = \langle (U|n\rangle\langle m|U^+) \rangle =$

ρ'_{mn} — матрица плотности после унит. преобраз.

$E = \sum_k |k\rangle\langle k|$ $\quad E = \sum_l |l\rangle\langle l|$

$= \langle \sum_{k,l} |k\rangle \underbrace{\langle k|U|n\rangle}_{U_{kn}} \underbrace{\langle m|U^+|l\rangle}_{U^+_{ml}} \langle l| \rangle =$

$= \sum_{k,l} U^+_{ml}\, \rho_{lk}\, U_{kn}$

$\Rightarrow \rho$ преобразуется как $\forall$ оператор

- $Tr\, \hat{A} = \sum a_i$

$\hat{A}$ — эрм. оп-р, a_i — соб. знач.

Аксиомы фон Неймана

- $\langle 1 \rangle = 1 = Tr(\hat{E}\hat{\rho}) = 1$ — условие нормировки для матрицы плотности
- возьмем произв. ЭО $\hat{A}$

все его знач. — вещ. числа $\Rightarrow$ его среднее — вещ. число $\Rightarrow$

$Tr A\rho = \langle A \rangle = \langle A \rangle^* = \sum_n \langle n|A\rho|n\rangle^* =$

$= \sum_n \langle n|\rho^+ \underbrace{A^+}_{=A}|n\rangle = Tr\, \rho^+ A =$ пос. св-ву

$= Tr\, A\rho^+ \Rightarrow Tr\, A\rho = Tr\, A\rho^+$

$\Rightarrow$ в силу произвольности $\hat{A}$

$\boxed{\rho^+ = \rho} \Rightarrow \hat{\rho}$ — ЭО

Тогда перейдем в базис собственных векторов $\hat{\rho}$

$\hat{\rho}|r_k\rangle = p_k |r_k\rangle$

в базисе r_k:

$$\rho = \begin{pmatrix} p_1 & & 0 \\ & p_2 & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix}$$

$\sum_k p_k = 1$

Образуем (элемент) проектор

$$\hat{P}_k^{(r)} = |r_k\rangle\langle r_k| = \begin{array}{c} \\ k \end{array}\begin{pmatrix} 0 & & & & \\ & \ddots & & & 0 \\ & & 1 & & \\ & 0 & & 0 & \\ & & & & \ddots \end{pmatrix}$$

При измерении $\hat{P}_k^{(r)}$ может получится 0 или 1, т.е. неотриц. число

$\Rightarrow \langle P_k^{(r)} \rangle \geq 0$ (по 3 акс. фон Неймана)

$Tr\,[P_k^{(r)}\rho] = p_k \geq 0$

$\Rightarrow 0 \leq p_k \leq 1, \quad \sum_k p_k = 1$

возьмем $\hat{A}$ с ПНС: $[\hat{A}, \hat{\rho}] = 0$ (коммутатор)

$\Rightarrow$ у $\hat{A}$ и $\hat{\rho}$ общ. сов. в-ра, они в базисе сов. в-ров диагональные.

$$\hat{A}|\gamma_k\rangle = a_k|\gamma_k\rangle \dots$$

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} a_1 & & 0 \\ & a_2 & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix}$$

вычтем из $\hat{A}$ среднее и возведем в квадрат:

$$(\hat{A} - \langle A\rangle)^2 = \begin{pmatrix} (a_1 - \langle A\rangle)^2 & & 0 \\ & (a_2 - \langle A\rangle)^2 & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix}$$

$$\langle A\rangle = Tr\, \hat{A}\hat{\rho} = \sum_k p_k a_k$$

$$D_A = Tr\left[(\hat{A} - \langle A\rangle)^2 \hat{\rho}\right] =$$

$$= \sum_k p_k (a_k - \langle A\rangle)^2 = 0$$ в чистом состоянии

тогда лишь $p_k = 0$, либо $a_k = \langle A\rangle$ (противор. нормировке)

$\Rightarrow \exists\, p_{k_0} \neq 0$, $a_{k_0} = \langle A\rangle$,

$p_{k \neq k_0} = 0$, из усл. нормировки $p_{k_0} = 1$

$\Rightarrow$ в чистом состоянии

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} 0 & & 0 \\ & 1 & \\ 0 & & 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} \\ \leftarrow k_0 \\ \\ \end{matrix} = |\gamma_{k_0}\rangle\langle\gamma_{k_0}|$$

$\langle A\rangle = \sum_k p_k a_k$

p_k – вероятность получить результат a_k

$\Rightarrow$ если у нас есть $\hat{\rho}$, то $p_k \equiv p_{a_k}$, а чистое состояние в этом случае $|\gamma_k\rangle \Rightarrow p_k$ это если и вероятность нахождения в состоянии $|\gamma_k\rangle$

$\sum_k p_k = 1 \Leftrightarrow$ закон сохранения вероятности

Теорема

Если $\exists$ состояние к-ое опис. $\hat{\rho}$, то это сос. является чистым тогда и только тогда, когда $\hat{\rho}$ является проектором

$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$, $|\psi\rangle$ – описывает это чистое состояние

Д-во: $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ – условие нормировки волн. фции

1) Работаем в базисе сов. ф-ции $\hat{\rho}$

$$D_A = Tr\left[(\hat{A} - \langle A\rangle)^2 \hat{\rho}\right] =$$

$$= \sum_k \langle\gamma_k| (\hat{A} - \langle A\rangle)^2 \hat{\rho} |\gamma_k\rangle =$$

($\hat{\rho}|\gamma_k\rangle = p_k|\gamma_k\rangle$)

$$= \sum_k p_k \underbrace{\langle\gamma_k| (\hat{A} - \langle A\rangle)}_{\langle\xi_k|} \cdot \underbrace{(\hat{A} - \langle A\rangle)|\gamma_k\rangle}_{|\xi_k\rangle}$$

$= \sum_k p_k \langle \xi_k | \xi_k \rangle \geq 0$

в прошл. чистом сост. $D_A = 0$

тогда $\forall k$ или $p_k = 0$ или $|\xi_k\rangle = 0$,

но это противорем. усл. нормир.

$\Rightarrow \exists p_{k_0} \neq 0$

$(\hat{A} - \underbrace{\langle A \rangle}_{a_k}) |\psi_{k_0}\rangle = 0$

$\Rightarrow A|\psi_{k_0}\rangle = a|\psi_{k_0}\rangle$

$\Rightarrow A|\psi_{k\neq k_0}\rangle \neq a|\psi_{k\neq k_0}\rangle$, иначе спектр скал. вырожд. Δ

$p_{k\neq k_0} = 0 \Rightarrow p_{k_0} = 1$, т. е.

$\rho_{чист.} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & | & 0 \\ 0 & 1 & & \\ \hline 0 & & | & 0 \end{pmatrix} = |\psi_{k_0}\rangle\langle\psi_{k_0}|$

г) пусть есть матрица плотности

$\rho = \begin{pmatrix} 0 & 0 & & 0 \\ 0 & 1 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & 0 \end{pmatrix} = |\psi_{k_0}\rangle\langle\psi_{k_0}|$

возьмем оператор

$\hat{B} = \begin{pmatrix} b_1 & & & 0 \\ & b_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \end{pmatrix}$

$\Rightarrow \langle B \rangle = b_{k_0}$

$D_B = 0 \Rightarrow$ чистое состояние

но мы не всегда можем сразу сказать можно ли представить $\hat{\rho}$ в виде $|\psi\rangle\langle\psi|$

Условие этого: $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$, т. е. $\hat{\rho}$ проектор

$\oplus$ условие нормировки

$\Rightarrow \hat{\rho}$ – элемент. проектор

возьмем ЭО $\hat{A}$ с ДНС

$A|\alpha_n\rangle = a_n|\alpha_n\rangle$

тогда

$\langle A \rangle = Tr(\hat{\rho}\hat{A}) = \sum_m \langle \alpha_m | \hat{\rho} \underbrace{A|\alpha_m\rangle}_{a_m|\alpha_m\rangle} =$

$= \sum_m a_m \underbrace{\langle \alpha_m | \hat{\rho} | \alpha_m \rangle}_{P_{a_m}}$ – вер-ть получить a_m

$\Rightarrow$ диаг. элемент матрицы плотности в α базисе – вер-ть

$P_{a_m} = P_{\alpha_m}$ – вер-ть пребывания в чистом состоянии $|\alpha_m\rangle$

итак,

1) $\rho^+ = \rho$, $Tr\,\hat{\rho} = 1$

2) $\langle A \rangle = Tr_\rho A\rho$

3) $P_{|\psi\rangle} = \langle\psi|\rho|\psi\rangle$

4) чистое сост. тогда и только тогда, когда ρ – элемент. проектор

* частный случай

пусть $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$

• $Tr\,\rho = \sum_n \langle n|\psi\rangle \cdot \langle\psi|n\rangle =$

$= \sum_n \langle\psi|n\rangle\langle n|\psi\rangle = \langle\psi|1|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle =$

$= 1$ – усл. нормир. для волн. ф-ии

• $\langle A\rangle = Tr\,[A|\psi\rangle\langle\psi|] =$

$= \sum_n \langle n|A|\psi\rangle\langle\psi|n\rangle =$

$= \sum_n \langle\psi|n\rangle\langle n|A|\psi\rangle \Rightarrow$

$\Rightarrow \langle A\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle$

в чист. сост. $|\psi\rangle$

• $P_{|x\rangle} = \langle x|\rho|x\rangle =$

$= \langle x|\psi\rangle\langle\psi|x\rangle = |\langle x|\psi\rangle|^2$

Лекция 5

25.02.04

Пусть спин ориент. вдоль x

т.е. мы наход. в чистом сост. со спином $+1/2$

по оси z:

$P_{+1/2} = P_{|z+\rangle} = |\langle z_+|x_+\rangle|^2$

Пусть мы пребываем в сост. $|\psi\rangle$

тогда $P_{|\psi\rangle} = |\langle\psi|\psi\rangle|^2 = 1$ –

физич. смысл условия нормировки

• Пусть есть произв. физ. величина A

$A|\alpha_n\rangle = a_n|\alpha_n\rangle$

A имеет ДНС

Пусть мы с достоверностью пребываем в состоянии $|\psi\rangle$, тогда

$P_{a_n} = |\langle\alpha_n|\psi\rangle|^2 = P_{|\alpha_n\rangle}$

$|\alpha_n\rangle$ – однозначный базис $\Rightarrow$

$\Rightarrow |\psi\rangle = \sum_m \psi_m|\alpha_m\rangle$, причем

$|\psi_m\rangle = \langle\alpha_m|\psi\rangle \Rightarrow P_{a_n} = |\psi_m|^2$

• $\langle A\rangle_{|\psi\rangle} = \langle\psi|A|\psi\rangle = \sum_m \langle\psi|a_m|\alpha_m\rangle \cdot$

$\cdot\langle\alpha_m|\psi\rangle = \sum_m a_m \underbrace{|\langle\alpha_m|\psi\rangle|^2}_{\text{вероятность получить } a_m}$

• Фаза волновой функции не наблюдаема, т.е. если заменим $|\psi\rangle$ на $|\psi'\rangle = |\psi\rangle e^{i\varphi}$, то ничего не изменится, т.к. это — унитарное преобраз., к-ое не меняет ни среднее, ни спектр, ни соб. в-ра, ни вероятности

Д-во: $\rho' = |\psi'\rangle\langle\psi'| = e^{i\varphi}|\psi\rangle\langle\psi|e^{-i\varphi} = |\psi\rangle\langle\psi| = \rho$

Пример влияния фазы

$$|x_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|z_+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|z_-\rangle$$

$$|x_+\rangle \neq |y_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|z_+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}i|z_-\rangle$$

=> нельзя менять относит. фазу слагаемых, но можно умножить на $e^{i\varphi}$ все выражение

Смешанное состояние

$$\rho = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & +\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$ — полностью неполяриз. состояние

$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

$|2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

вер-ть пребыв. в 1 сост. $1/2$, во 2 сост. $1/2$

$$P_{|\psi\rangle} = \langle\psi|\rho|\psi\rangle = \langle\psi|\frac{1}{2}|\psi\rangle = \frac{1}{2}$$ для $\forall$ состояния

1 источник индетерминизма — смеш. состояние

$$\begin{pmatrix} \frac{2}{3} & 0 \\ 0 & 1/3 \end{pmatrix}$$ — частично поляриз. состояние

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$ — чистое состояние

пусть есть чистые состояния

$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$ $\quad |\psi'\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$

$P_{|\psi\rangle} = \langle\psi|\rho|\psi\rangle = 1$

$P_{|\psi'\rangle} = 0$

Совместимые и несовместимые наблюдаемые. Соотношение неопределенностей

Совместимыми называются наблюдаемые, к-ые при измерении принимают точные ~~опред~~ значения, одновр., т.е. $D = 0$

у них $[A;B] = 0$

несовместимые $[A;B] \neq 0$

но даже если $[A;B] = 0$, то это не значит что они всегда имеют одноврем. опред. значения

например, $[\hat{E};\hat{A}] = 0$,

но $D_E = 0$, а для $\hat{A}$ можно найти смеш. состояние

Противоп. пример $[A, B] \neq 0$.

но $\exists |\psi\rangle$:

$A|\psi\rangle = a|\psi\rangle \qquad D_A = 0$

$B|\psi\rangle = b|\psi\rangle \qquad D_B = 0$

Утв 1

Если физ. велич. A имеет ДНС, тогда из того что она прин. опред. знач. в каком-то сост. $\Rightarrow$, что велич. B прин. точн. знач., если $[A, B] = 0$, т.е.

$$\left.\begin{array}{l} D_A = 0 \\ [A; B] = 0 \end{array}\right| \Rightarrow D_B = 0$$

Утв. 2.

Пусть есть ЭО A и B, $[A, B] = 0$, тогда $\exists$ базис на каждом из сост. к-го эти величины одновремен. измеримы, т.е. приним. опред. знач.

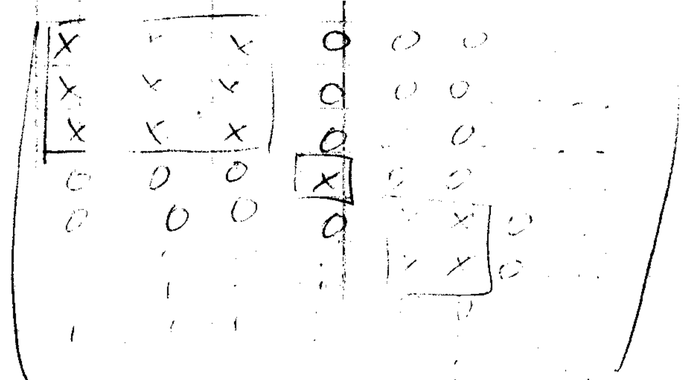
Д-во:

возьмем базис одного из операторов, напр. A. Перенумеруем соб. в-ра и соб. знач., чтобы все одинак. соб. знач. стояли рядом. В этом базисе, напр.

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & & & & & \\ & a_1 & & & 0 & \\ & & a_1 & & & \\ & & & a_2 & & \\ & 0 & & & a_3 & \\ & & & & & a_3 \\ & & & & & & \ddots \end{pmatrix}$$

по т-ме $\langle \alpha_n | B | \alpha_m \rangle = 0$, если $a_m \neq a_n$.

тогда



$$B = \begin{pmatrix} \boxed{\begin{matrix} x & x & x \\ x & x & x \\ x & x & x \end{matrix}} & \begin{matrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} & \cdots \\ \begin{matrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} & \boxed{x} & \begin{matrix} 0 & 0 \\ x & x \end{matrix} \\ \vdots & \vdots & \begin{matrix} 0 & 0 \\ x & x \end{matrix} \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}$$

x - нецв. число

блочно-диагональная структура.

Теперь рассм. подпр-во гильб. пр-ва, которое сост. из векторов $|\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle, |\alpha_3\rangle$

тогда $A = a_1 \begin{pmatrix} 1 & & 0 \\ & 1 & \\ 0 & & 1 \end{pmatrix} = a_1$

$$B = \begin{pmatrix} x & x & x \\ x & x & x \\ x & x & x \end{pmatrix}$$

образуем новый базис из соб. в-ров B: $|\alpha_1'\rangle, |\alpha_2'\rangle, |\alpha_3'\rangle$

в нем B - диагональный
A - единичный

$\Rightarrow$ мы изобрели базис, в к-ом A и B диагональны

Если теперь заменим исходный базис на $|\alpha_1'\rangle, |\alpha_2'\rangle, |\alpha_3'\rangle, |\alpha_4\rangle, \ldots$, то в нем

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & & & & \\ & a_1 & & 0 & \\ & & a_1 & & \\ & 0 & & \ddots & \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} b_1 & & \\ & b_2 & \\ & & b_3 \end{pmatrix}$$

остальное не изм.

Таким же образом обрабатываем каждый диагональный блок матрицы $\hat{B}$ в полученном базисе, где обе матрицы диагональны, что и требовалось док-ть

Полный набор наблюдаемых

Одночастичный спин системы

$$S_1^2 = \begin{pmatrix} 0 & & \\ & 0 & \\ & & 0 \end{pmatrix} \qquad S_2 = \begin{pmatrix} 0 & & \\ & 0 & \\ & & 0 \end{pmatrix}$$

3х кратное вырожд. — 2х кратное вырожд.

но

$$5S^2 + S_2 = \begin{pmatrix} 0 & & \\ & 10 & \\ & & 10 \end{pmatrix}$$

- невырожд., но не имеет физ. смысла

Будем брать в качестве спектра значений:

$(0,0)$ $(2,1)$ $(6,0)$ $(2,-1)$

Полным набором наблюдаемых назовем такой набор ЭО, напр. четырех $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \hat{D}$ если они
1) попарно коммутируют
2) $\exists$ базис, к-ый является базисом их собств. векторов (всех четырех) и собств. значения:
(a_1, b_1, c_1, d_1)
(a_2, b_2, c_2, d_2)
все различные наборы

например, уровни атома описываются квантовыми числами n, l, m

Соотношение неопределенностей

Пусть есть ЭО $\hat{A}$ и $\hat{B}$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$$

убедимся, что $\hat{C}$ - ЭО:

$$-i\hat{C}^+ = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+ - \hat{A}^+\hat{B}^+ =$$

$$= \hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B} = -[\hat{A}, \hat{B}] = -i\hat{C}$$

$$\Rightarrow \hat{C}^+ = \hat{C}, \text{ т.е. } \hat{C} \text{ - ЭО}$$

пусть $\tilde{\hat{A}} = \hat{A} - \langle A \rangle$

$\tilde{\hat{B}} = \hat{B} - \langle B \rangle$

$$[\tilde{\hat{A}}, \tilde{\hat{B}}] = [\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$$

$\Delta_A = \langle \tilde{\hat{A}}^2 \rangle$ $\qquad \Delta_B = \langle \tilde{\hat{B}}^2 \rangle$

определим $\hat{F} = \tilde{\hat{A}} + i\lambda\tilde{\hat{B}}$ $\qquad \lambda$ - число $\neq 0$ (вещест.)

тогда $\hat{F}^+ = \tilde{\hat{A}}^+ - i\lambda\tilde{\hat{B}}^+ = \tilde{\hat{A}} - i\lambda\tilde{\hat{B}}$

$\hat{\mathcal{D}} = F^+F$ — ЭО, неотрицат.

$\hat{\mathcal{D}}|\psi\rangle = d|\psi\rangle \quad | \cdot \langle\psi|$

$\langle\psi|\hat{\mathcal{D}}|\psi\rangle = d\langle\psi|\psi\rangle = d =$

$= \underbrace{\langle\psi|F^+}_{\langle 3|} \cdot \underbrace{F|\psi\rangle}_{|3\rangle} = \langle 3|3\rangle \geq 0$

$\Rightarrow$ Дискретный спектр.

! Соотнош. неопр. справедл. для всех сост.

$\langle D \rangle \geq 0$

с друг. стор.

$D = (\tilde{A} - i\lambda\tilde{B})(\tilde{A} + i\lambda\tilde{B}) =$

$= \tilde{A}^2 + \lambda^2\tilde{B}^2 + i\lambda[A;B] =$

$= \tilde{A}^2 + \lambda^2\tilde{B}^2 - \lambda C$

$\langle D \rangle = \langle \tilde{A}^2 \rangle + \lambda^2 \langle \tilde{B}^2 \rangle - \lambda \langle C \rangle \geq 0$

$\langle C \rangle^2 - 4 D_A D_B \leq 0$

$\Rightarrow \boxed{D_A D_B \geq \frac{\langle C \rangle^2}{4}}$

$\sqrt{D_A} = \delta A$ — среднеквадратичное отклонение

$\boxed{\delta A \, \delta B \geq \frac{\langle C \rangle}{2}}$

Лекция 6

3.03.04

$D_A D_B \geq \frac{\langle C \rangle^2}{4}$

$\delta A \, \delta B \geq \frac{\langle C \rangle}{2}$

$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}$

$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$

$\delta x \, \delta p \geq \frac{\hbar}{2}$

[illegible] $\cos p$ — [illegible]

Составные системы

$|n_1\rangle$ или $|n\rangle_1$ — базисы

$|n_2\rangle$ или $|n\rangle_2$

базис системы

$|n_1\rangle |n_2\rangle$

$\Updownarrow$

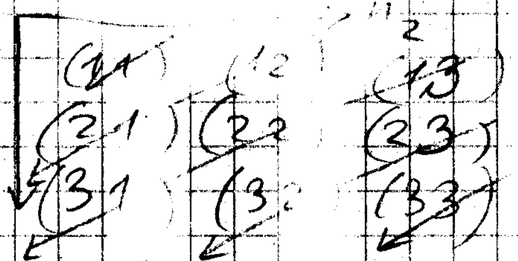
$|n_1 n_2\rangle$

если $\dim 1 = 2$, $\dim 2 = 2$ $\Rightarrow$ $\dim$ с.с. $= 4$

чистое состояние

$|\psi\rangle = \sum_{n_1, n_2} \psi_{n_1 n_2} |n_1 n_2\rangle$

$\langle n_1 n_2 | A | m_1 m_2 \rangle = A_{n_1 n_2 m_1 m_2}$



Пусть состояние описано $\rho_{(n_1,n_2)(m_1,m_2)}$

$A^{(1)}$ - наблюдаемая

$A^{(1)} |n_1\rangle |n_2\rangle$

$\langle m_1 m_2 | A^{(1)} | n_1 n_2 \rangle = A^{(1)}_{(m_1 m_2)(n_1 n_2)} =$

$= A^{(1)}_{m_1 n_1} \cdot \delta_{m_2 n_2}$

матрица 2×2

матрица 4×4

Опр. Операторы, описывающие измерение первой подсистемы

$$\langle A^{(1)} \rangle = \sum_{\substack{n_1 n_2 \\ m_1 m_2}} \rho_{(n_1 n_2)(m_1 m_2)} A^{(1)}_{m_1 n_1} \delta_{n_2 m_2} =$$

$$= \sum_{n_1 n_2} \rho_{(n_1 n_2)(m_1 m_2)} A^{(1)}_{m_1 n_1}$$

$$\rho^{(1)}_{m_1 n_1} = \sum_{n_2} \rho_{(n_1 n_2)(m_1 m_2)} = \mathrm{Tr}_2 \rho$$

$$\Rightarrow \langle A^{(1)} \rangle = \sum_{n_1 m_1} \rho^{(1)}_{n_1 m_1} A^{(1)}_{m_1 n_1} =$$

$$= \mathrm{Tr}_1 \rho^{(1)} A^{(1)}$$

Итак,

$$\rho^{(1)} = \mathrm{Tr}_2 \rho \qquad \rho^{(2)} = \mathrm{Tr}_1 \rho$$

$\Rightarrow$ Вычисление средних составных систем по чистым смешанным сводится к ρ_1 и ρ_2.

$$\begin{array}{ccccc} x & + & z & \to & z \\ y & + & c & \to & c \\ c & + & z & & \\ c & + & c & \to & \begin{cases} z \\ c \end{cases} \end{array}$$

т.е.

$$z \to \begin{cases} z + z \\ c + c \end{cases}$$

$$c \to \begin{cases} z & c \\ c & z \\ c & c \end{cases}$$

Т.е.

$$|\psi_1\rangle \cdot |\psi_2\rangle = |\psi\rangle = \sum_{n_1 n_2} \psi^{(1)}_{n_1} \psi^{(2)}_{n_2} |n_1 n_2\rangle$$

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = |\psi_2\rangle|\psi_2\rangle\langle\psi_1|\langle\psi_1|$$

$$\rho^{(1)} = \mathrm{Tr}_2 \rho = \sum_{n_2} \langle n_2 | \left(|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle \cdot \langle\psi_2|\langle\psi_1| \right) |n_2\rangle = \sum_{n_2} |\langle n_2|\psi_2\rangle|^2 |\psi_1\rangle\langle\psi_1|$$

чист. сост.

$|4\rangle \rightarrow \rho_1 \neq \rho_1^2$
$\rho_2 \neq \rho_2^2$

Д-во:
пример

$|1\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ $|2\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$

$|4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2\right) + \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2\right)$

запутанное состояние (entanglement)

$\rho \quad |4\rangle\langle 4| =$

$\begin{pmatrix} 1\cdot 1 & 1\cdot 0 & 1\cdot 2 & 1\cdot 2 \\ 0\cdot 1 & 0\cdot 0 & 0\cdot 2 & 0\cdot 2 \\ 2\cdot 1 & 2\cdot 0 & 2\cdot 2 & 2\cdot 2 \\ 2\cdot 1 & 2\cdot 0 & 2\cdot 2 & 2\cdot 2 \end{pmatrix}$

$\rho_1 = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}$

$\rho_2 = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}$

чистое запутанное состояние каждая из составных подсистем будет смешанным

$\rho_{11}^{(1)} = \rho_{(11)(11)} + \rho_{(12)(12)} = \frac{1}{2}$

$\rho_{22}^{(1)} = \rho_{(21)(21)} + \rho_{(22)(22)} = \frac{1}{2}$

$\rho_{12}^{(1)} = \rho_{(11)(21)} + \rho_{(12)(22)} = 0$

$\rho_{21}^{(1)} = (\rho_{12}^{(1)})^* = 0$

$\rho_1 = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix} = \rho_2$ – максимально перепутанное сост.

Параграф, связанный с составными системами

2) $|4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2 + \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2\right)$

перв. сист. нахож в этом сост.

берем во вторую подсистему и учтем со получим с запутанностью системами.

(1) (2)

$|\quad\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ $|\quad\rangle = \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}$

(нет ... имеет вид)

$|4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|12\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|21\rangle =$

$= ac\,|11\rangle + ad\,|12\rangle + bc\,|21\rangle +$

$+ bd\,|22\rangle$

$ac = 0$
$bd = 0$; $abcd = 0$

$ad = \frac{1}{\sqrt{2}}$
$bc = \frac{1}{\sqrt{2}}$ } $abcd = \frac{1}{2}$

) парадокс!

2) Эйнштейна - Подольского - Розена

1) сов. сист. распад. на 2 части.

$p_0 = 0$ импульс

$p_1 + p_2 = 0$

p_1 p_2

точно измерили p_1, значит p_2, то $p_1 + p_2 \neq 0$

$\Delta p_1 \approx 0$ $\Delta x_2 \neq 0$

$p_2 = -p_1$ ⇒ нарушен соотношение неопределённостей

$\Delta p_1 = -\Delta p_2 \neq 0$

в эксперименте $\Delta p_2 \cdot \Delta x_2 \geq \frac{\hbar}{2}$

а) p

экран г-ду с импульсом p, ориентированный

Δx - размер точки

$\Delta p \, \Delta x < \frac{\hbar}{2}$

x_1 Δx

экран

Если проведем эксперимент еще раз другая точка

δx - расстояние между двумя разными точками на экране

x_2

x_1

первое

второе

3) ЭПР

$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\right)$

$S_x^{(1)} = \frac{1}{2}$ $S_x^{(2)} = -\frac{1}{2}$

$S_z^{(1)} = -\frac{1}{2}$ $S_z^{(2)} = -\frac{1}{2}$

$\rho^{(1)} = \begin{pmatrix}1/2 & 0\\ 0 & 1/2\end{pmatrix}$ $\rho^{(2)} = \begin{pmatrix}1/2 & 0\\ 0 & 1/2\end{pmatrix}$

лекция 7

9.03.04

1) $|\psi\rangle$

2) ЭПР I

$\delta p \cdot \Delta x < \frac{\hbar}{2}$

$\delta p \cdot \delta x \geq \frac{\hbar}{2}$

$\delta x' = \Delta x$

$\delta x' \cdot \delta p' \geq \frac{\hbar}{2}$

3) ЭПР II

$\rho = \begin{pmatrix}1/2 & 0\\ 0 & 1/2\end{pmatrix}$

$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ $\bar{\rho} = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}$

4) GHZ - Гринбергер - Хорн - Зайлингер

Система из 3х частиц

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_3 + \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_3$$

$a = \begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix} = 2S_x$

$b = \begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix} = 2S_y$

} отн. по оси x каждой из 3х ч-ц

$a_1, a_2, a_3; b_1, b_2, b_3$ - отн. к оси z - частей

$\boxed{a_1 \neq a_2}$

a_i замечает i-й столбец!

Составим 5 операторов

$A_1 = a_1 a_2 a_3$ $\quad A_1|\psi\rangle = 1|\psi\rangle$

$A_2 = a_1 b_2 b_3$ $\quad A_2|\psi\rangle = -1|\psi\rangle$

$A_3 = b_1 a_2 b_3$ $\quad A_3|\psi\rangle = -1|\psi\rangle$

$A_4 = b_1 b_2 a_3$ $\quad A_4|\psi\rangle = -1|\psi\rangle$

$A_5 = A_2 A_3 A_4$ $\quad A_5|\psi\rangle = -1|\psi\rangle$

Спектр $a_i \to$ с 3 ± 1

$b_i \to$ с 3 ± 1

(неправ.) Вывод: раз спектр такой, как выше указ, то a_i принимает знач. $\alpha_i = \pm 1$

b_i — " — $\beta_i = \pm 1$

Правильное утверждение:

Если мерить a_i или b_i, то будет получ. $+1$ или -1, т.е. не прин. опред. знач.

Из неправ. вывода:

$A_1 = \alpha_1\alpha_2\alpha_3 = 1$

$A_5 = \alpha_1\alpha_2\alpha_3(\beta_1\beta_2\beta_3)^2 = \alpha_1\alpha_2\alpha_3 = 1$

$= -1 \Rightarrow \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ ~~$\exists$~~

$A_5 = -1$ с вер. $\geq 0{,}85$

(ост. 15% не попали в детектор)

Упростим эффект:

$$|z_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|x_+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|x_-\rangle \neq \begin{cases}|x_+\rangle\ P_+ = \frac{1}{2}\\ |x_-\rangle\ P_- = \frac{1}{2}\end{cases}$$

для $|x_+\rangle$ $\quad S_z = \begin{cases}+1 & P_+ = 1/2\\ -1 & P_- = 1/2\end{cases}$

$|x_-\rangle$ $\quad S_z = \begin{cases}+1 & P_+ = 1/2\\ -1 & P_- = 1/2\end{cases}$

} $|z_+\rangle = \frac{1}{2}$, $|z_-\rangle = \frac{1}{2}$

5) Кот Шредингера

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle|k_+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\rangle|k_-\rangle$$

Динамика в квантовой механике

Спектры атомов - 2 индекса

комбинац. принц. Ритца: $\omega_{nm} = \omega_{nk} + \omega_{km}$

положим $m = 1$, тогда

$$\omega_n \equiv \omega_{n1} = \omega_{nk} + \omega_{k1} \equiv \omega_k$$

т.о. $\forall$ г-ты

$$\omega_{nk} = \omega_n - \omega_k$$

$$\omega_{nk} \leftrightarrow x_{nk} e^{i\omega_{nk} t} = e^{i\omega_n t} x_{nk} e^{-i\omega_k t}$$

$E_\Phi = \hbar \omega_{nk}$ - фотон с энергией E_Φ

$E_\Phi = \hbar\omega_{nk} = \hbar\omega_n - \hbar\omega_k = E_n - E_k$

энергия атома до и после излучения

$$\hat{x}(t) = \begin{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}E_1 t} & 0 & \\ 0 & e^{\frac{i}{\hbar}E_2 t} & \\ & & \ddots \end{pmatrix} \hat{x}(0) \begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} & 0 & \\ 0 & e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t} & \\ & & \ddots \end{pmatrix}$$

решение ур-ния для к-ты: $x_{nk}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}E_n t} x_{nk}(0) e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}$

Определим оператор энергии (гамильтониан), как матрицу, диаг. в данном базисе

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_1 & & 0 \\ & E_2 & \\ 0 & & E_3 \ddots \end{pmatrix}$$

$$e^{\pm\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = \begin{pmatrix} e^{\pm\frac{i}{\hbar}E_1 t} & & 0 \\ & e^{\pm\frac{i}{\hbar}E_2 t} & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix}$$

$$\left[e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\right]^+ = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}^+ t} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = \left[e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\right]^{-1}$$

(унитарная матрица)

Мы получили:

$$\hat{x}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\, \hat{x}(0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

$$\hat{A}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\, \hat{A}(0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

$\forall$ физ. величина

$$\hat{H}(t) = \hat{H}$$

$$\frac{d}{dt}\hat{A}(t) = \frac{i}{\hbar}\underbrace{\hat{H} e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}(0)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}}_{\hat{A}(t)} + \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}(0)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}}_{\hat{A}(t)}\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\right) =$$

$$= \frac{i}{\hbar}\left[H; A(t)\right]$$

Сосредоточим оператор

$$A(t) \equiv t\hat{H}$$

$$\frac{d}{dt}A(t) = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}; \hat{H}t\right] = 0 = \hat{H} \quad (?)$$

$$\left[\frac{d}{dt}A(t) = \frac{\partial}{\partial t}A(t) + \frac{i}{\hbar}\left[H(t); A(t)\right]\right]$$

↑ Уравнение Гейзенберга

Формальное решение имеет вид:

$$A(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} A(0) e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

Задача решения ур-ия Г. эквив-на по сложн. нахождению $\exp(\frac{i}{\hbar}Ht)$ и СВ и СЗ $\hat{H}$

Интегралы движения.

Непрерывная симметрия

Инт-л движ. $\hat{C}(t)$:

$$0 = \frac{\partial}{\partial t}\hat{C}(t) + \frac{i}{\hbar}[H(t); C(t)]$$

чаще всего

$\Rightarrow [H; C] = 0$

ПНН $\to \hat{H}, C_1, C_2$ – инт-лы движ.

$[C_1; C_2] \neq 0 \to$ ВС H !

$V(r) \to l_x, l_y, l_z$ $\quad [l_x; l_y] \neq 0$

$[H; l_i] = 0$

$H, l_z, l^2 \to n_r, m, l$ – ПНН

Непр. симметрией ~~называется~~ зависящ. от параметра a назыв. такой набор унит. операторов, что:

1) $U(0) \equiv 1$

2) $U^+(a)\,U(a) = 1$

3) $U^+(a)\,\hat{H}\,U(a) = \hat{H}$

4) $U(a)$ – непр.

Докажем 3°:

$$e^{ia\hat{C}}\hat{H}\,e^{-ia\hat{C}} = \left[e^{A}Be^{-A} = B + \frac{1}{1!}[A;B] + \frac{1}{2!}[A[A,B]] + \dots\right]$$

ф-ла Бейкера-Хаусдорфа

$$= \hat{H} + ia\underbrace{[\hat{C};\hat{H}]}_{0} + 0 + 0 + \dots = \hat{H}$$

т. о. $U(a) = e^{-iaC}$ – непр. симметрия

НС $\to$ С

$$U(a) = \underbrace{U(0)}_{1} + a\underbrace{U'(0)}_{iC} + \dots$$

исслед. св-ва С:

$$U^+U = (1 - a_i C^+ + \dots)(1 + iaC + \dots) =$$

$$= 1 = 1 + ia(C - C^+) + \dots$$

$\Rightarrow C - C^+ = 0 \Rightarrow C^+ = C$ – эрмитов

Докажем, что С – интеграл движ.

$$\hat{H} = U^+(a)\hat{H}U(a) = (1 - iaC + \dots)H \cdot$$

$$\cdot(1 + iaC + \dots) = H + ia(CH + HC) + \dots =$$

$$= H + ia[H; C] + \dots \Rightarrow [H; C] = 0$$

$\Rightarrow$ С – инт-л движения

$$U(a) = e^{iaC + ia^2C^2 \pm}$$

Лекция 8

10.03.04

$[H; C] \leftrightarrow U(a)$

$U(a) = e^{iaC}$ $\quad iC = U'(0)$

ПНН

Унит. оператор $e^{\frac{i}{\hbar}\hat{p}a}$ – трансляция системы на вел-ну a, если $\hat{p}$ – импульс

$e^{\frac{i}{\hbar} l_z \varphi}$ - поворот вокруг оси z на угол φ

Сохр. энергии

Пусть $H(t) = H$, то $\exists$ оператор трансляции по времени

$$e^{\frac{i}{\hbar} H t} H e^{-\frac{i}{\hbar} H t} = H$$

Формир. реш-ие ур. Гейзенб.:

$$A(t) = e^{+\frac{i}{\hbar} H t} A(0) e^{-\frac{i}{\hbar} H t}$$

Будем рассм. сист., для кот.

$H \neq H(t)$, тогда:

1) Все наблюдаемые сохр. свою эрмитовость

$$A^+(0) = A(0) \Rightarrow A^+(t) = A(t)$$

2) Все операторные соотнош. сохр. например, если $A(0) = B(0) \cdot C(0)$,

то $A(t) = B(t) C(t)$

Д-во: $e^{\frac{i}{\hbar} H t} A(0) e^{-\frac{i}{\hbar} H t} =$

$= e^{\frac{i}{\hbar} H t} B(0) e^{-\frac{i}{\hbar} H t} e^{\frac{i}{\hbar} H t} \cdot C(0) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} H t}$

3) Сохранение спектра

если $A(0)|\psi\rangle = a|\psi\rangle$, то

$$A(t)|\tilde{\psi}\rangle = a|\tilde{\psi}\rangle$$

$$|\tilde{\psi}\rangle = e^{+\frac{i}{\hbar} H t}|\psi\rangle$$

Д-во:

$$A(t)|\tilde{\psi}\rangle = e^{\frac{i}{\hbar} H t} A(0) e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} H t}|\psi\rangle =$$

$$= a e^{\frac{i}{\hbar} H t}|\psi\rangle = a|\tilde{\psi}\rangle$$

Следствие г):

сохр. коммутац. соотн.:

$$[A(t); B(t)] = i C(t)$$

$\langle A \rangle = \mathrm{Tr} A\rho$

В классич. мех. перем. $\Leftrightarrow$ сост. = $x(t), p(t)$

Квант. мех. — $A(t)$ $\rho(t)$

Теперь можно записать:

$$\langle A(t) \rangle = \mathrm{Tr}[A(t)\rho]$$

Задача: Эволюция спина, помещ. в поле H_z:

$$\hat{H} = -\vec{\mu}\vec{H} = -2\mu_0 \hat{\vec{S}}\vec{H} =$$

$$= -2\frac{e\hbar}{2mc}\hat{S}_z H_z = -\hbar\frac{eH_z}{mc}\hat{S}_z = -\hbar\omega S_z$$

ω - лармор. ч-та

$$\frac{d}{dt}S_z = \frac{i}{\hbar}[-\hbar\omega S_z; S_z] = 0$$

$$\Rightarrow S_z(t) = S_z(0)$$

Для осн. компонент:

$$\frac{d}{dt}S_x = \frac{i}{\hbar}[-\hbar\omega\hat{S}_z; \hat{S}_x] = -i\omega i\hat{S}_y = \omega\hat{S}_y$$

$$\frac{d}{dt}S_y = \frac{i}{\hbar}[-\hbar\omega\hat{S}_z; \hat{S}_y] = -\omega S_x$$

(Вращение, аналог. классич. механике)

$$\begin{cases} S_x(t) = S_x(0)\cos\omega t + S_y(0)\sin\omega t \\ S_y(t) = S_y(0)\cos\omega t - S_x(0)\sin\omega t \end{cases}$$

Пусть $t=0$ спин смотрел вдоль ox:

$$S_x(0)\,|\psi\rangle = \frac{1}{2}|\psi\rangle$$

Найдем напр-е спина в момент t

Построим оператор проек-ия спина на ось $\vec{n}$:

$$S_{n(t)} = \vec{n}(t)\,\vec{S}(t)$$

$$n(t) = (\cos\omega t;\ -\sin\omega t;\ 0)$$

Подставив, получаем: $S_{n(t)} = S_x(0)$

$$S_{n(t)}\,|\psi\rangle = S_x(0)\,|\psi\rangle = \frac{1}{2}|\psi\rangle$$

т.е. спин смотрит в напр. $\vec{n}(t)$

Общий случай

Пусть в нач. момент - чист. сост.:

$$A(0)\,|\psi\rangle = a\,|\psi\rangle$$

находим $A(t)$

необх. сооружать $B(t) = A(0)$:

$$B(t)\,|\psi\rangle = A(0)\,|\psi\rangle = a\,|\psi\rangle$$

Представление Шредингера

ПГ → ПШ

Выбор базиса - представление переход от стационн. к движ. базису.

$$A_ш = U^+ A_г U$$

$$\rho_ш = U^+ \rho_г U$$

$$|\psi_ш\rangle = U^+ |\psi_г\rangle$$

$$U = e^{\frac{i}{\hbar}Ht}$$

$$A_ш(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\cdot e^{\frac{i}{\hbar}Ht} A_г(0)\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} e^{\frac{i}{\hbar}Ht} = A_г(0) = A_ш(0)$$

$$\rho_г(t) = \rho_г(0)$$

$$|\psi_г(t)\rangle = |\psi_г(0)\rangle$$

$$\rho_ш(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\rho_г(t)e^{\frac{i}{\hbar}Ht}$$

$$\rho_ш(0) = \rho_г(0)$$

$$\left[\frac{d}{dt}\rho_ш(t) = -\frac{i}{\hbar}[H(t);\rho_ш(t)]\right]$$

ур-ие Шр. для матрицы плотности

Для чистого состояния:

$$|\psi_ш(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\psi_г(t)\rangle$$

$$|\psi_г''(0)\rangle = |\psi_ш(0)\rangle$$

$$\frac{d}{dt}|\psi_ш(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar}H(t)\,|\psi_ш(t)\rangle$$

$$\left[i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_m(t)\rangle = H(t)\,|\psi_m(t)\rangle \right]$$

нестац. ур-ие Шред.

Формальное ур-ие Шр.:

$$|\psi_m(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} H t}\,|\psi_m(0)\rangle$$

$\boxed{H|\varepsilon_n\rangle = E_n|\varepsilon_n\rangle}$ - стац. ур. Шр.

Решение стац. ур. Шр. назыв. стацион. уровнями системы

Если в $t=0$:

$|\psi_m(t=0)\rangle \equiv |\varepsilon_n\rangle$, то!

$$|\psi_m(t)\rangle = \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}}_{\text{фазовый множитель (не наблюдается)}}\,|\varepsilon_n\rangle$$

↑ стац. сост.

Более того, если:

$|\psi(0)\rangle = \sum_n \psi_n |\varepsilon_n\rangle$, то эволюция имеет вид:

$$|\psi_m(t)\rangle = \sum_n \psi_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}\,|\varepsilon_n\rangle$$

$$P_{|\varepsilon_n\rangle} = |\psi_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}|^2 = |\psi_n|^2$$

вер-ть найти в кажд. из сост.

$$e^{\frac{i}{\hbar} H t} = \sum_n e^{\frac{i}{\hbar} E_n t}\,|\varepsilon_n\rangle\langle\varepsilon_n|$$

$$e^{\frac{i}{\hbar} H t} \to U(t)$$

Оператор эволюции и его свойства

$t_a \longrightarrow t_b$

нач. момент — направление эволюции

т.о. оператор эв. имеет вид $U(t_b, t_a)$. Требуется:

1) $A_r(t_b) = U(t_b; t_a) A_r(t_a) U^+(t_b, t_a)$

2) $|\psi_m(t_b)\rangle = U^+(t_b; t_a)\,|\psi_m(t_a)\rangle$

3) $|\psi_m(t_b)\rangle = U^+(t_b, t_a)\,|\psi_r(t_b)\rangle$
$(= U^+|\psi(t_a)\rangle)$

Св-ва

1) Унитарность

2) $U(t_a; t_a) = 1$

3) $U(t_b; t_c)\,U(t_c; t_a) = U(t_b; t_a)$

4) $U(t_a; t_b) = U^{-1}(t_b; t_a)$

Унитарная эволюция

Если только $H^+ = H$, то эволюция унитарна

В случае унит. эв. не происх. рождения и уничтожения ч-ц.

Д-во:

$$\langle\psi(0)|\psi(0)\rangle = 1 =$$

$$= \langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \langle\psi(0)|U(t,0)\cdot U^+(t,0)|\psi(0)\rangle$$

Физич. смысл ун. перенор.:

1) $|\psi\rangle$: $P_{|\psi\rangle} = |\langle\psi|\psi\rangle|^2 = 1$

2) A - наблюд.

$A|\alpha_m\rangle = a_m|\alpha_m\rangle$

$\langle\psi|\psi\rangle = \sum |\langle\alpha_m|\psi\rangle|^2 = 1 =$

$= \sum P_{a_m}$

<1 - умир. ч-цы

>1 - разд. ч-цы

17.03.04

лекция 9

оператор эволюции $\hat{U}(t_b, t_a) = \lim_{N\to\infty} \prod_{k=N-1}^{k=0} e^{\frac{i}{\hbar} H(t_k)\cdot\Delta t}$

описывает эволюцию „по кусочкам"

очевидные свойства:

- $\hat{U}(t_a, t_a) = 1$
- $\hat{U}(t_b; t_c)\cdot\hat{U}(t_c; t_a) = \hat{U}(t_b, t_a)$
- $\hat{U}^{-1}(t_b, t_a) = \hat{U}(t_a, t_b)$
- $\hat{U}^{+}(t_b; t_a)\cdot\hat{U}(t_b; t_a) = 1$, если $\hat{H}^{+} = \hat{H}$

д-во:

$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{+}(t_b)\Delta t} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{+}(t_1)\cdot\Delta t} \cdot \ldots \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{+}(t_{n-1})\cdot\Delta t} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_{n-1})\cdot\Delta t} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_{n-2})\cdot\Delta t} \cdot \ldots \cdot e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_0)\cdot\Delta t} = 1$

- описывается выражением для оператора эволюции

$$\frac{d}{dt_b}\hat{U}(t_b, t_a) = \frac{\hat{U}(t_b+\Delta t, t_a) - \hat{U}(t_b, t_a)}{\Delta t} =$$

$$= \frac{\hat{U}(t_b+\Delta t, t_b) - 1}{\Delta t}\cdot\hat{U}(t_b, t_a) = \text{посл. 2}$$

$$= \frac{e^{\frac{i}{\hbar}H(t_b)\Delta t} - 1}{\Delta t}\,\hat{U}(t_b, t_a) = \frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_b)\hat{U}(t_b, t_a) =$$

$$= \frac{d}{dt_b}\hat{U}(t_b, t_a)$$

иногда здесь пишут „-"

интегрируем $\int_{t_a}^{t_b}$

$\hat{U}(t_b, t_a) - \hat{U}(t_a; t_a) = \int_{t_a}^{t_b} \frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_1)\cdot\hat{U}(t_1, t_a)\,dt_1$

получили интегральное ур-ие

решаем методом последовательных итераций

$\hat{U}(t_b, t_a) = 1 + \int_{t_a}^{t_b} \frac{i}{\hbar} H(t_1)\hat{U}(t_1, t_a)\,dt_1$

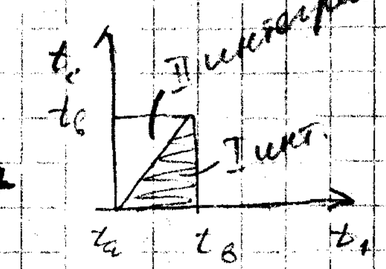
$\hat{U}(t_1, t_a) = 1 + \int_{t_a}^{t_1} \frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_2)\hat{U}(t_a, t_2)\,dt_2$

$\hat{U}(t_2, t_a) =$ — и — и т.д.

т.о.

$$\hat{U}(t_b, t_a) = 1 + \int_{t_a}^{t_b}\frac{i}{\hbar}H(t_1)\,dt_1 + \int_{t_a}^{t_b}\frac{i}{\hbar}H(t_1)dt_1\int_{t_a}^{t_1}\frac{i}{\hbar}H(t_2)dt_2 + \ldots$$

преобразуем 2-ой интеграл



$$\frac{1}{2!}\cdot\left(\frac{i}{\hbar}\right)^2\left\{\int_{t_a}^{t_b}dt_1 H(t_1)\int_{t_a}^{t_1}dt_2 H(t_2) + \int_{t_a}^{t_b}dt_2 H(t_2)\int_{t_a}^{t_2}dt_1 H(t_1)\right\}$$

$\frac{1}{2!}$ — число перестановок переменных t_1 и t_2

оператор временного упорядочивания

$$\hat{T}[H(t_1)\cdot H(t_2)] = \begin{cases} H(t_1)\cdot H(t_2) & \text{при } t_1 > t_2 \\ H(t_2)\cdot H(t_1) & \text{при } t_2 > t_1 \end{cases}$$

тогда

$$\hat{U}(t_b, t_a) = \frac{(i/\hbar)^2}{2!}\hat{T}\int_{t_a}^{t_b}\int dt_1 dt_2 \hat{H}(t_1)\cdot\hat{H}(t_2)$$

для того, чтобы интегрировать, на самом деле надо сначала упорядочить

$$= \hat{T}\,\frac{1}{2!}\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} d\tau\, H(\tau)\right]^2$$

Очевидно, что третье слагаемое в ряде:

$$\hat{T}\,\frac{1}{3!}\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} d\tau\, H(\tau)\right]^3$$

Замечание

$T[H(t_1)\cdot H(t_2)\cdot H(t_3)]$ упорядочивает так, чтобы времена стояли в порядке убывания

$$T = \left[\begin{array}{l} H(t_2)\,H(t_1)H(t_3) \qquad t_2 > t_1 > t_3 \\ \vdots \end{array}\right.$$

Остальные слагаемые приводятся к аналог. виду. Получим ряд для exp:

$$\left[\hat{U}(t_b;t_a) = \hat{T}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} d\tau\, H(\tau)\right]\right]$$

на самом деле при решении задач можно просто оборвать ряд на каком-то члене

В большинстве задач

$H(\tau) = H$, тогда

$$\left[\hat{U}(t_b;t_a) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}H\cdot(t_b - t_a)\right\}\right]$$

Выпишем осн. формулы:

1) если есть оператор эволюции

$$A_Г(t_b) = U(t_b, t_a)\,A_Г(t_a)\,U^+(t_b, t_a)$$

если U удовлетв. диф. ур., то $A_Г(t_b)$ удовлетв. ур-ию Гейзенберга (если $A_Г(t_a)$ удовл.)

$$\rho_Г(t_b) = \rho_Г(t_a)$$

$$\left(|\psi_Г(t_b)\rangle = |\psi_Г(t_a)\rangle\right)$$

2) $A_Ш(t_b) = A_Ш(t_a)$

если не зависят явно от времени

$$\rho_Ш(t_b) = U^+(t_b, t_a)\,\rho_Ш(t_a)\,U(t_b, t_a)$$

если мы измеряем чистое сост.

$$|\psi_Ш(t_b)\rangle = U^+(t_b, t_a)\,|\psi_Ш(t_a)\rangle$$

3) $A_Г(t_a) = A_Ш(t_a)$

$$\rho_Г(t_a) = \rho_Ш(t_a)$$

$$|\psi_Г(t_a)\rangle = |\psi_Ш(t_a)\rangle$$

Одномерное движение материальной точки

мат. точка — то для описания чего достаточно $\hat{x}$ и $\hat{p}$

$$[\hat{x};\hat{p}] = i\hbar$$

$\hat{x}\,|x\rangle = x\,|x\rangle$

соб. вектор ∃!

МТ ⇒ невырожденность спектра

если МТ со спином, то спектр вырожден

$\hat{A}\,|\alpha_m\rangle = a_m\,|\alpha_m\rangle$

невыр. дискр. спектр

$\langle\alpha_n|\alpha_m\rangle = \delta_{nm}$

теперь если $A\,|\alpha_a\rangle = a\,|\alpha_a\rangle$,

то $\langle\alpha_a;\alpha_b\rangle \sim \delta(a-b)$

т.е. индекс м.б непрерывно меняющийся

$|\psi\rangle = \sum_m \psi_m\,|\alpha_m\rangle$

где теперь $\psi_m = \langle\alpha_m|\psi\rangle$

теперь $|\psi\rangle = \int d\alpha\; \psi(a)\,|\psi_a\rangle$

$\hat{1} = \sum_m |\alpha_m\rangle\langle\alpha_m| \Rightarrow$ теперь $1 = \int da\,|\alpha_a\rangle\langle\alpha_a|$

$\hat{A} = \sum_m |\alpha_m\rangle\langle\alpha_m| \cdot a_m$

теперь $A = \int d\alpha\; |\alpha_m\rangle\langle\alpha_m|\,a$

вероятность $P_{a_m} = P_{|\alpha_m\rangle} = |\psi_m|^2 =$

$= |\langle\alpha_m|\psi\rangle|^2$

условие нормировки

з-н сохр. вероятности

$1 = \langle\psi|\psi\rangle = \sum_m |\psi_m|^2 =$

$= \sum_m P_{a_m}$

для непр. спектра

$1 = \langle\psi|\psi\rangle = \int da\,\langle\psi|\alpha_a\rangle \cdot$

$\cdot\,\langle\alpha_a|\psi\rangle = \int da\,|\psi(a)|^2$

$P_{[a_1;a_2]} = \int_{a_1}^{a_2} da\,|\psi(a)|^2$

$\Rightarrow |\psi(a)|^2$ - плотность вероятности,

$\Rightarrow$ размерная величина

ψ_m - безразмерная

$\psi(a) \sim \frac{1}{\sqrt{a}}$ т.е. зависит от представления

Замечание

если спектр - кусочно-непрерывный, кусочно-дискретный, то:

(бывает, что внутри непр. отрезка может попасться дискрет. уровень)

ДС - дискр. спектр НС - непр. спектр

$1 = \sum_{ДС} |\alpha_m\rangle\langle\alpha_m| + \int_{НС} da\,|\alpha_a\rangle\langle\alpha_a|$

$A = \sum_{ДС} a_m\,|\alpha_m\rangle\langle\alpha_m| + \int_{НС} da\cdot a\cdot|\alpha_m\rangle\langle\alpha_m|$

Оператор координаты

$\hat{x}\,|x\rangle = x\,|x\rangle$

$\langle x|x'\rangle = \delta(x'-x)$

$|\psi\rangle \to \langle x|\psi\rangle = \psi(x)$

волн. ф-ия

волн. ф-ия, хотя по смыслу это к-т разложения по базису соб. ф. оператора коор-ты

$\langle x'|\hat{x}|x\rangle = \langle x'|x|x\rangle =$

матрич. эл-т

$= x\langle x'x\rangle = x\cdot\delta(x'-x)$

Пусть мы пребывали в сост. $|\psi\rangle$, подействовали на него $\hat{x}$

$|\chi\rangle = \hat{x}|\psi\rangle$

$\langle x|\chi\rangle = \chi(x) = \langle x|\hat{x}|\psi\rangle =$

$= \langle x|x|\psi\rangle = x\langle x|\psi\rangle = x\cdot\psi(x)$

Принято считать, что

$\hat{x}\,\psi(x) = x\,\psi(x)$

$|\chi\rangle = \hat{p}|\psi\rangle$

Лекция 10

23.03.04

$\langle x'|\hat{\rho}|x\rangle \Rightarrow \rho(x',x)$

формулы для средних значений

$\langle x'|\hat{A}|x\rangle \Rightarrow A(x,x')$

потенц. энергия $V(x)$

$= \langle x'|V(x)|x\rangle = V(x)\langle x'|x\rangle = V(x)\delta(x'-$

$\langle x'|\hat{V}(x)|x\rangle \Rightarrow \cancel{V(x)\delta(x'-x)}$ - диаг. оператор

$Tr[\hat{A}\hat{\rho}] = \int dx\,\langle x|\hat{A}\underbrace{\ }_{\int dx'|x'\rangle\langle x'|}\rho|x\rangle =$

$= \iint dx\,dx'\,A(x',x)\,\rho(x'x)$

аналог $\sum_{m,n} A_{mn}\rho_{nm}$

$\langle V(x)\rangle = \int dx\,\underbrace{\rho(x,x)}_{\text{диаг. эл-т } \rho \text{ (плотность вер-ти пребывания в т. } x)}V(x)$

Пусть есть чистое сост.

$|\chi\rangle = \hat{p}|\psi\rangle$

определим унитарный оператор $U = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{p}a\right)$ число

совершим преобраз. оператора к-ты

$\cancel{\frac{i}{\hbar}\hat{p}a\,x = x}$

$e^{\frac{i}{\hbar}\hat{p}a}\,\hat{x}\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}a} = \hat{x} + \frac{1}{1!}\overbrace{\left[\frac{i}{\hbar}\hat{p}a;\hat{x}\right]}^{a} +$

$+\frac{1}{2!}\left[\frac{i}{\hbar}\hat{p}a,\left[\frac{i}{\hbar}\hat{p}a;x\right]\right]_{=0} + \underbrace{\ldots}_{=0} =$

a

$= \hat{x} + a$ – унит. преобраз. трансляции

С.В.: $|\tilde{x}\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}a}|x\rangle$

$\hat{x}|\tilde{x}\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}a}\cdot\frac{i}{\hbar}\hat{p}a\,\hat{x}\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}a}|x\rangle =$

$= e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}a}(x+a)|x\rangle = (x+a)|\tilde{x}\rangle$

$|\tilde{x}\rangle \underset{\text{т.е. л.з}}{\sim} |x+a\rangle \quad (= \lambda|x+a\rangle)$

(но не $= |x+a\rangle$!)

Докажем, что $|\lambda|^2 = 1$

$\Delta\langle\tilde{x}'|\tilde{x}\rangle = \langle x'+a|\lambda^*\cdot\lambda|x+a\rangle =$

$= |\lambda|^2\cdot\delta(x'-x)$

С др. стороны $\langle\tilde{x}'|\tilde{x}\rangle =$

$= \langle x'|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{p}a}\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}a}|x\rangle =$

$= \langle x'|x\rangle = \delta(x'-x)$

отсюда $|\lambda|^2 = 1 \qquad \lambda = e^{i\varphi} \qquad \varphi - \forall$

$|x\rangle \qquad |x+a\rangle$

$e^{i\varphi_1} \qquad e^{i\varphi_2}$

Согласуем фазы

$\lambda = 1$ – просто наше соглашение!

$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}a}|x\rangle = |x+a\rangle$

Эрмитово сопряжаем

$\langle x|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{p}a} = \langle x+a|$

$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}a}\psi(x) = \langle x|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{p}a}|\psi\rangle =$

$= \langle x+a|\psi\rangle = \psi(x+a)$

$a \to 0$:

$\psi(x) + \frac{i}{\hbar}\hat{p}a\,\psi(x) + \ldots = \psi(x) +$

$+ a\psi'(x) + \ldots;$

$$\boxed{\hat{p} \equiv \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}}$$

Убедимся, что если это так, то выполняется соотношение с exp:

$e^{\frac{i}{\hbar}\hat{p}a}\psi(x) = e^{a\frac{d}{dx}}\psi(x) =$

$= \psi(x) + \frac{a}{1!}\psi'(x) + \frac{a^2}{2}\psi''(x) + \ldots = \psi(x+a)$

– сдвиг влево

$$\boxed{[\hat{x};\hat{p}]\psi(x) = i\hbar\psi(x)}$$ – импульсное представление

$\hat{p}|p\rangle = \underset{\text{число}}{p}|p\rangle$

$\psi(p) = \langle p|\psi\rangle$ – ВФ в имп. предст.

$\hat{p}\psi(p) = p\psi(p)$

$\hat{x}\psi(p)$ – ?

$e^{\frac{i}{\hbar}\hat{p}a} \to e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{x}b}$ – знак "–", т.к. коммутатор между $[\hat{x};\hat{p}]$

$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{x}b}\,\hat{p}\,e^{\frac{i}{\hbar}\hat{x}b} = \hat{p} + b$

$p^{-\frac{i}{\hbar}\hat{x}b}\psi(p) = \psi(p+b)$,

т.о. $\boxed{\hat{x} = -\frac{\hbar}{i}\cdot\frac{d}{dp}}$

выведем:

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle = \langle x| \int dp\, |p\rangle\langle p|\psi\rangle =$$

$$= \int dp \langle x|p\rangle \psi(p)$$

$$\psi(p) = \int dx \langle p|x\rangle \psi(x)$$

необх. найти $\langle x|p\rangle$

обозначим $\psi_p(x) = \langle p|x\rangle^*$

применим оператор p:

$$\hat{p}\,\psi_p(x) = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi_p(x) = \langle x|\hat{p}|p\rangle =$$

$$= \langle x|p|p\rangle = p\,\psi_p(x)$$

$$\psi_p(x) = N e^{\frac{i}{\hbar}px}$$

$$\delta(p-p') = \langle p'|p\rangle = \int dx \underbrace{\langle p'|x\rangle}_{\psi^*_{p'}(x)}\underbrace{\langle x|p\rangle}_{\psi_p(x)} =$$

$$= \int dx \cdot |N|^2 e^{-\frac{i}{\hbar}p'x} e^{\frac{i}{\hbar}px} = |N|^2 \cdot 2\pi\,\delta\left(\frac{p}{\hbar} - \frac{p'}{\hbar}\right) =$$

$$= |N|^2 \cdot 2\pi\hbar \cdot \delta(p-p')$$

$$N = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\varphi} \qquad \varphi - \forall \text{ фаза}$$

На самом деле – 2 разных базиса, их можно умножать на что угодно

$e^{i\varphi} \to 1$ – соглашение

$$\langle x|p\rangle = \psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px}$$

$$\boxed{\psi(p) = \int dx \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}px}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\psi(x)}$$ – преобраз. Фурье

$\exists$ обр. преобраз.

$$\psi(x) = \int dp \cdot \frac{e^{\frac{i}{\hbar}px}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\psi(p)$$

Знаки такие, что $[\hat{x};\hat{p}] = i\hbar$

Матрица плотности:

$$\langle x'|\rho|x\rangle = \rho(x',x) = \int dp'dp \cdot$$

$$\cdot \langle x'|p'\rangle \cdot \langle p'|\rho|p\rangle \cdot \langle p|x\rangle =$$

$$= \iint dp'dp \cdot e^{\frac{i}{\hbar}p'x'} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\rho(p',p) \cdot \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}px}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

Это переход от ρ_p к ρ_x путем двойного преобраз. Ф.

Физический смысл непрерывного спектра. Волновые пакеты.

$\psi(x)$ – чист. сост.

$$|\psi\rangle = \int dx\, \psi(x)|x\rangle$$

$|\psi\rangle$ – С.В. для какого-то $\hat{A}$

$\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle$ – ДС

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2$$

непр. спектр

$|p\rangle$; $\psi_p(x) = \langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px}$ –

нельзя нормировать, т.к. $\int = \infty$,

т.е. это не сост. матер. т.

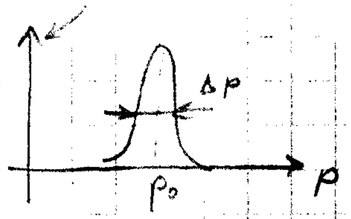
В нек. книгах написано, что $\psi_p(x)$ опис. ∞ кол-во ч-ц, заполн. все пр-во и имеют импульс p — неверно!

Ex Допустим, $\langle\psi|\psi\rangle = 2$

она опис. 2 ч-цы ?
сост. непр. спектра не соотв. реальному состоянию

Определим волн. пакеты, чтобы описать сост. ч-ц, у к-ых импульс с высок. точностью $= p_0$, описать движение электрона в ЭЛТ.

$|\psi(p)|^2$ - плотн. вер-ти иметь импульс $= p$



Δp - мало

Утв. + такая кривая приведет к тем же рез-там, что и у нас

мы получим простую кривую - Гауссоиду (работаем с чист. сост.

$$\psi(p) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\,\Delta p}} \exp\left[-\frac{(p-p_0)^2}{2(\Delta p)^2} - \frac{i}{\hbar}px_0\right]$$

Выпишем то же в коорд. представл.:

$$\int dx\, e^{-ax^2+bx} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}\, e^{-b^2/4a}$$

$$\psi(x) = \int dp \frac{e^{\frac{i}{\hbar}px}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\psi(p) = \int dp \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\Delta p}}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\cdot$$

$$\cdot \exp\left\{\frac{i}{\hbar}p(x-x_0) + \frac{i}{\hbar}p_0(x-x_0) - \frac{p^2}{2\Delta p^2}\right\} =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\Delta x}} \exp\left\{-\frac{(x-x_0)^2}{2\Delta x^2} + \frac{ip_0(x-x_0)}{\hbar}\right\},$$

где $\Delta x = \frac{\hbar}{\Delta p}$

$\langle x\rangle = \int dx |\psi(x)|^2 \cdot x = x_0$

$\langle p\rangle = \int dp |\psi(p)|^2 p = p_0$

$D_x = \frac{\Delta x^2}{2}$ $\qquad D_p = \frac{\Delta p^2}{2}$

Замечание:

$D_x D_p = \frac{\hbar^2}{4}$

Пусть $\Delta p = \sqrt{\hbar}\, c$ $\ll p_0$
$\Delta x = \frac{\sqrt{\hbar}}{c}$ $\ll x_0$ — можно описать движение эл-на в ЭЛТ

2

Лекция 11

24.03.04

для своб. ч-цы $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$

$$\psi(p,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\psi(p,0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t}\psi(p) =$$

$$= [\hat{p}\psi = p\psi \text{ - имп. предст.}] = e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t}\psi(p)$$

$$\psi(x,t) = \int dp \frac{e^{\frac{i}{\hbar}px}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\psi(p,t) =$$

только потому, что работаем в коорд. предст.

только потому, что работаем с Шр.

$$= \int dp \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi}\,\Delta p} \exp\left\{ -\frac{(p-p_0)^2}{2\Delta p^2} + \frac{i}{\hbar} p(x-x_0) - \right.$$

$$\left. -\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t \right\} = \left[p \to p + p_0 \right] = \int dp \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{\pi}\,\Delta p} \cdot$$

$$\cdot \exp\left\{ -\frac{p^2}{2\Delta p^2} + \frac{2}{\hbar} p(x-x_0) + \frac{i}{\hbar} p_0 (x-x_0) - \right.$$

$$\left. -\frac{i}{\hbar} \frac{p_0^2}{2m} t - \frac{i}{\hbar} \frac{p p_0}{m} t - \frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t \right\} = \ldots$$ дальше

Допустим, что $\frac{1}{2\Delta p^2} \gg \frac{1}{\hbar} \frac{1}{2m} t$

$\frac{\hbar}{\Delta p} = \Delta x \gg \underbrace{\frac{\Delta p}{m}}_{\Delta v} t$ ← весь интервал времени, в тел. кот. прочих наблюд.

добавка к неопред-ти в коорд-те

$$\approx \int dp \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{\pi}\,\Delta p} \exp\left\{ -\frac{p^2}{2\Delta p^2} + \frac{i}{\hbar} p\left(x - x_0 - \frac{p_0}{m} t\right) + \right.$$

$$\left. + \frac{i}{\hbar} p_0 \left(x - x_0 - \frac{p_0}{2m} t\right) \right\} \left[- \ldots \right]$$

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\,\Delta p} \exp\left\{ -\frac{\left(x - x_0 - \frac{p_0}{m} t\right)^2}{2\Delta x^2} + \frac{i}{\hbar} p_0 \left(x - x_0 - \right.\right.$$

$$\left.\left. - \frac{p_0}{2m} t\right) \right\}$$

Замечания

1) Мы получили гауссов пакет

$\frac{p_0}{m}$ – ск-ть огибающей

$e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t}$ осциллирующая по времени

$E_0 = \frac{p_0^2}{2m}$

Соотношение между $v_{гр}$ и $v_ф$

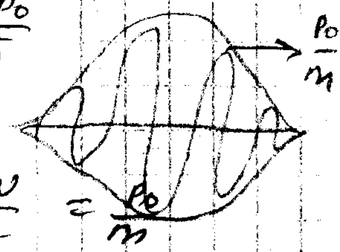
$v_{гр} = \frac{p_0}{m}$ $\quad v_ф = \frac{p_0}{2m}$

$v_{гр} = 2 v_ф$

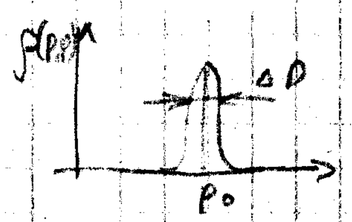
2) волн. число $k = \frac{p_0}{\hbar}$

$\omega = \frac{E_0}{\hbar}$

$v_ф = \frac{\omega}{k} = \frac{p_0}{2m}$ $\quad v_{гр} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{p_0}{m}$

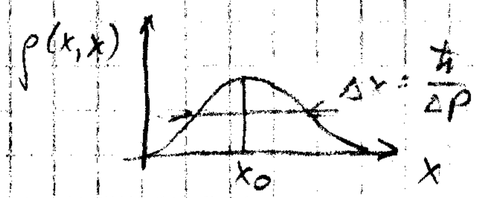


3) на самом деле



$\hat{x} = -\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp}$

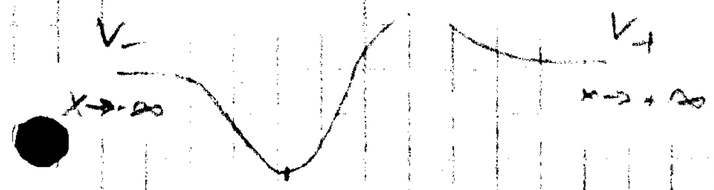
$\langle x \rangle = x_0 - \int dp \left(-\frac{\hbar}{i}\right) \underbrace{\rho_1'(p,p)}_{\text{диаг. эл-т}}$ ← произв. по 1 арг-ту



Общие свойства стационарного ур-ия Шредингера в одномерном движении

Пусть $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(x)$

Хотим проанализировать поведение



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

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right)\psi(x)=E\psi(x)$$

$$\psi''+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi=0$$ - лин диф ур. 2 порядка

опред-ль вронского

$$W(\psi_1,\psi_2)=\psi_1\psi_2'-\psi_1'\psi_2$$

$$\frac{d}{dx}W=(\psi_1'\psi_2'+\psi_1\psi_2''-\psi_1''\psi_2-\psi_1'\psi_2')=$$

$$=\psi_1\frac{2m}{\hbar^2}(V-E)\psi_2-\frac{2m}{\hbar^2}(V-E)\psi_1\psi_2=0$$

Пусть $W=0$

$$\frac{\psi_1'}{\psi_1}=\frac{\psi_2'}{\psi_2} \Rightarrow \ln\psi_1=\ln\psi_2+\ln c$$

$\psi_1=c\psi_2 \Rightarrow$ лин. завис.

$x\to+\infty$ $\quad V(x\to+\infty)=V_+$

а) $\underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}(\underbrace{E-V_+}_{=k_+^2})}>0$

$$\psi(x)=A_+e^{ik_+x}+B_+e^{-ik_+x}$$

б) $\frac{2m}{\hbar^2}(E-\underbrace{V_+}_{=-\varkappa_+^2})<0$

$$\psi(x)=A_+e^{+\varkappa_+x}+B_+e^{-\varkappa_+x}$$

$\langle\alpha_n|\alpha_m\rangle=\delta_{nm}$ $\quad\langle\alpha_n|\alpha_m\rangle=1$ - дискр. спектр

$\langle\alpha_a|\alpha_b\rangle=\delta(a-b)$ - непр.

! $\langle\alpha_n|\alpha_a\rangle=0$

Для E_i дискр.: $\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_i|^2dx=1$

Для E: $\int_{-\infty}^{\infty}E^*_{E'}(x)\psi_E(x)dx=\delta(E-E')$

для ДС: $\begin{cases}\psi_-(x\to-\infty)=Ae^{\varkappa_-x}+0\\ \psi_+(x\to+\infty)=Be^{-\varkappa_+x}+0\end{cases}$

можно построить ψ: реализуется ψ_1 и ψ_2 тогда и только тогда, когда

$W(\psi_-,\psi_+)=0$

Причем $E<V_+$, $E<V_-$ $\Rightarrow$ эн. спектр лежит ниже обеих асимптот. пот-ла

Теорема

Дискретный спектр лежит выше минимума потенциала, т.е. $E>V_0$

Д-во: (от противного)

пусть $E<V_0$

$$\psi''+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi=0 \quad \cdot\psi^* \text{ и } \int_{-\infty}^{\infty}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\left(\psi''+\frac{2m}{\hbar^2}\underbrace{(E-V)}_{<0}\psi\right)\overset{\text{по частям}}{=}0=$$

$$=\psi^*\psi'\Big|_{-\infty}^{\infty}+\int_{-\infty}^{+\infty}\Big[\underbrace{-\psi^{*\prime}\psi'}_{<0}+\underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi^*\psi}_{<0}\Big]=0$$

$\Rightarrow E>V_0$

Рассм случай непр. спектра $E>V_+, V_-$

$$\psi_1(x\to+\infty)=A_+e^{ik_+x}$$

$\psi_2(x\to-\infty) = B_+ e^{-ik_+x}$

$\int dx\, \psi_{E'}^* \psi_E = \int dx\, e^{-ik_+'x} e^{ik_+x} \sim \delta(k_+ - k_+') \sim$

$\sim \delta(E-E') = \delta\left(\frac{\hbar^2}{2m}k_+^2 + V_+ - \frac{\hbar^2}{2m}k_+'^2 - V_+\right) =$

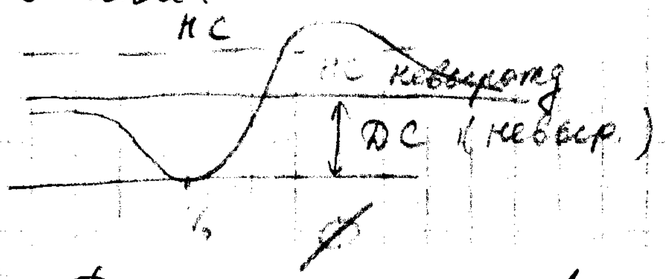
$= \delta\left(\frac{\hbar^2}{2m}(k_+ + k_+')(k_+ - k_+')\right) = \frac{2m}{\hbar^2(k_+ + k_+')}\delta(k_+ - k_+')$

Пусть, например, $V_+ > E > V_-$

на $+\infty$ $B_+ e^{-\varkappa_+ x}$

на $-\infty$ $\underbrace{A_- e^{ik_-x} + B_- e^{-ik_-x}}_{НС}$

имеем однократно вырожд. непр. спектр в итоге:



Теорема о нулях: (осцилляционная т-ма)

$\forall$ уровня ДС кол-во корней в точности совпадает с номером уровня, или уровни нумеровать от нуля

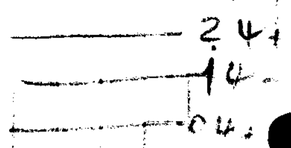
Теорема о четном потенциале

Пусть $V(x) = V(-x)$

Тогда все мн-во волн ф-ий дискр. спектра (а значит и уровни ДС) делятся на чет. и нечет.:

$\psi_+(-x) = \psi_+(x)$

$\psi_-(-x) = -\psi_-(x)$



Д-во:

$\psi(x)$ - решение

по $\psi(-x)$ тогда ~~точное~~ тоже решение:

но $\exists!$ л. незав. реш. $\Rightarrow \psi(-x) = c\,\psi(x)$

$\psi(-(-x)) = \psi(x) = c^2\psi(x)$ $\quad c^2 = 1 \Rightarrow c = \pm 1$

Лекция 12

31.03.04

Д.С. физ. смысл - стац. сост.

его эволюция - набег фазы

Н.С. непосредств. физ. смысла нет

$\psi_1(x\to+\infty) = A_+ e^{ik_+x}$

$\psi_2(x\to-\infty) = B_+ e^{-ik_+x}$

работаем с ψ_1

$\psi_1(x\to-\infty) = A_- e^{ik_-x} + B_- e^{-ik_-x}$

поделим на A_-

$k_- \equiv k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_-)}$

$k_+ \equiv q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_+)}$

$\frac{B_-}{A_-} = r(E) = r(k) = r$

$\frac{A_+}{A_-} = t(E) = t(q) = t$

$\psi(x\to-\infty) = e^{ikx} + re^{-ikx}$

$\psi(x\to+\infty) = te^{iqx}$

Это не задача рассеяния, т.к. кв. ч-ца не опис. плоской волной

Уравнение непрерывности и з-н сохр. вер-ти

Нестац. ур. Шр.

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$$

в коорд. пред.:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x,t) + V(x)\psi(x,t) \quad |*\psi^*$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^* = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi^{*\prime\prime} + V^* \psi^* \quad |*\psi$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(\psi\psi^*) = -\frac{\hbar^2}{2m}\underbrace{(\psi^*\psi'' - \psi\psi^{*\prime\prime})}_{W' \text{ вронскиан}} + (V - V^*)\psi^*\psi =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} W'(\psi^*, \psi) - (V - V^*)\psi^*\psi$$

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 + \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\hbar}{2mi} W(\psi^*, \psi)\right] = \frac{1}{i\hbar}(V - V^*)\psi^*\psi$$

дифференц. з-н сохр. вер-ти

з-н сохр. вер-ти нарушается комплексного потенциала

но у нас $V = V^* \Rightarrow$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}\underbrace{|\psi|^2}_{\text{плотн. } \rho} + \frac{\partial}{\partial x} j = 0$$

проинт. $\int_{x_1}^{x_2} dx$

$$\frac{\partial}{\partial t}\underbrace{\int_{x_1}^{x_2} |\psi|^2 dx}_{P(x_1;x_2)} = -j(x_2) + j(x_1)$$

$P(x_1;x_2)$ - вер-ть, что ч-ца в $[x_1; x_2]$

ψ - решение стац. ур. Шр

$\Rightarrow \psi^*$ - реш. ур. Шр.

$\Rightarrow W(\psi^*, \psi) = const$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial x} j = 0$$

$$\rho = |\psi(x,t)|^2 = \left|\psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\right|^2 \text{ не зав. от } t$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}\rho = 0$$

Плоская волна

$$\psi = e^{ikx} = e^{\frac{i}{\hbar}px}$$

поток вер-ти $j = \frac{\hbar}{2mi}\left(e^{-ikx} ik e^{ikx} - e^{ikx}(-ik)e^{-ikx}\right) = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v$

ч-ца переносит со скор. v вправо единичную плотность вер-ти

$$\psi = e^{ikx} + r e^{-ikx}$$

поток вер-ти $j = \frac{\hbar}{2mi} W\left(\left(e^{-ikx} + r^* e^{ikx}\right), \left(e^{ikx} + r e^{-ikx}\right)\right) =$

$$= \frac{\hbar}{2mi}\underbrace{\frac{\hbar k}{m}}_{\text{падает. волна}} - \underbrace{|r|^2 \cdot \frac{\hbar k}{m}}_{\text{отраж. волна}}$$

$$j_{\text{прош.}} = \frac{\hbar q}{m}|t|^2$$

Опр

Коэф-ент отражения назов.

$$R = \frac{j^0}{j^H} = |r|^2$$

Опр

Коэф-ент прохождения назов.

$$T = \frac{j^T}{j^H} = \frac{q}{k}|t|^2$$

$$j(x \to -\infty) = \frac{\hbar k}{m} - |r|^2 \frac{\hbar k}{m} =$$

$$= j(x \to +\infty) = \frac{\hbar q}{m}|t|^2$$

$$1 - R = T$$

$$\boxed{R + T = 1}$$

Предпол., что $V_+ = V_- = 0$

$$\Rightarrow k^2 = q^2 = \frac{2m}{\hbar} E$$

$$p = \hbar k$$

$$\psi_E(x \to -\infty) = e^{\frac{i}{\hbar} px} + r(p) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} px}$$

$$\psi_E(x \to +\infty) = t(p)\, e^{\frac{i}{\hbar} px}$$

Введем ф-ию: $\chi(p) = \frac{1}{\sqrt{\pi \Delta p}} \exp\left\{ -\frac{(p-p_0)^2}{2\Delta p^2} - \frac{i}{\hbar} p x_0 \right\}$

положим в нее $x_0 \equiv 0$

Предполагаем, что

1) $x_\pm \gg \Delta x = \frac{\hbar}{\Delta p}$ — x-ы практически точечные

размер пакета, т.е. в той области, где заведомо нах. x-ца

2) $\Delta x \gg \frac{\Delta p}{m} T_\pm$

т.е. времена расплыв. пакета — все времена, с к-ми имеем дело

3) $r(p_0 \pm \Delta p) \equiv r(p_0)$

$$t(p_0 \pm \Delta p) = t(p_0)$$

т.е. Δp мало, а $r(p)$ не очень сильно зависит

$$\psi_E(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t} \underbrace{\psi_E(x)}_{\text{в нач. момент } t}$$

итак, волн. ф-ия, опис. расплывание одной точ. x-цы на потенциале:

$$\chi(x,t) = \int dp\, \chi(p) \cdot \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}}_{\text{нормиров. множитель}} \cdot \psi_E(x,t)$$

найдем асимптотику этой ф-ии

$$\chi(x \to +\infty, t) = \int dp \frac{1}{\sqrt{\pi \Delta p}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \cdot$$

$$\cdot \exp\left[-\frac{(p-p_0)^2}{2\Delta p^2} - \frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t + \frac{i}{\hbar} px \right] \cdot \underbrace{t(p)}_{t(p_0)}$$

$$= t(p_0) \frac{1}{\sqrt{\pi \Delta x}} \exp\left[-\frac{\left(x - \frac{p_0}{m}t\right)^2}{2\Delta x^2} + \right.$$

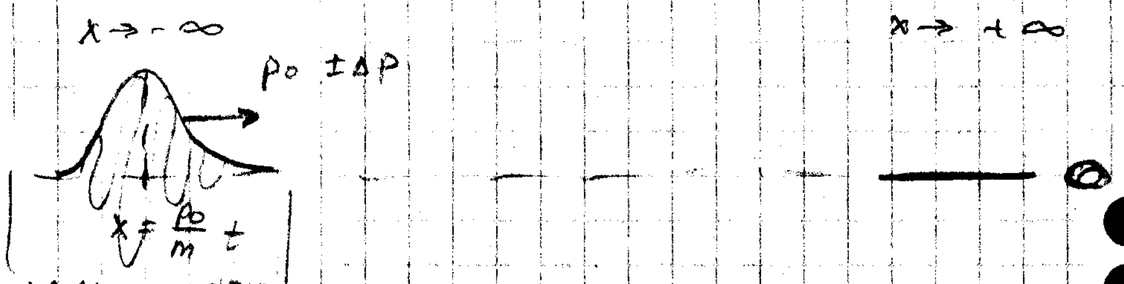
$$\left. + \frac{i}{\hbar} p_0 \left(x - \frac{p_0}{2m} t \right) \right]$$

$$\chi(x \to -\infty, t) = 1 \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi \Delta x}} \exp\left[-\frac{\left(x - \frac{p_0}{m}t\right)^2}{2\Delta x^2} + \right.$$

$$\left. + \frac{i}{\hbar} p_0 \left(x - \frac{p_0}{2m} t \right) \right] + r(p_0) \frac{1}{\sqrt{\pi \Delta x}} \cdot$$

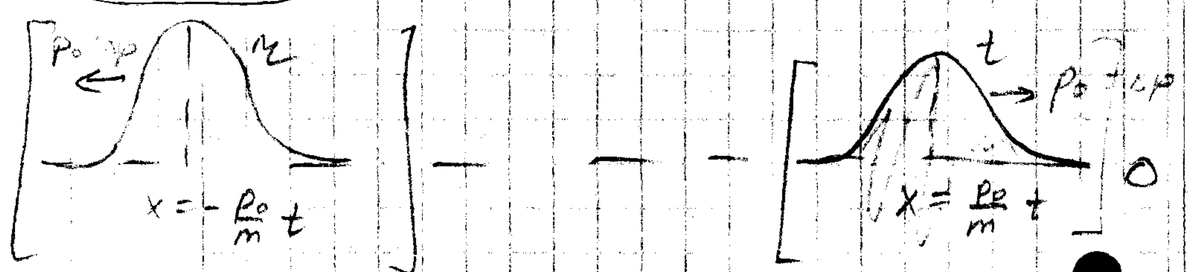
$$\cdot \exp\left[-\underbrace{\frac{\left[+x+\frac{p_0^2}{m}t\right]^2}{2\Delta x}}_{\text{гауссовый пакет}}+\frac{i}{\hbar}p_0\left(-x-\frac{p_0}{2m}t\right)\right]$$

$t \to -\infty$



если прошл. по этому отрезку, то получим 1 поршиность в коорд-те мала

$t \to +\infty$



$\int dx = |r|^2 = R$ $\qquad$ $\int dx = |t|^2 = T$

Реальная картина рассеяния:

волновой пакет налетает с импульсом p_0 с дост. хорошей точностью Δp, потом мы имеем 2 пакета

Периодический потенциал

$V(x+a) = V(x)$

$\psi_1(x)$ $\qquad$ $\psi_2(x)$ – решения

$W(\psi_1, \psi_2) = V \neq 0$, т.е. лин. нез.

заменим в ур-ии Шр. $x \to x+a$

$\psi_1(x) \to \psi_1(x+a) \Rightarrow \left.\begin{matrix}\psi_1(x+a)\\ \psi_2(x+a)\end{matrix}\right|$ реш. ур. Шр.

$\psi_1(x+a) = A\psi_1(x) + B\psi_2(x)$

$\psi_2(x+a) = C\psi_1(x) + D\psi_2(x)$

$W(\psi_1(x+a); \psi_2(x)) = W(\psi_1(x) + \ldots$

лекция 13

6.04.04

Период пот-и

$v(x+a) = v(x)$

$W(u_1, u_2) = v \neq 0$

$u_1(x+a) = A u_1(x) + B u_2(x)$

$u_2(x+a) = C u_1(x) + D u_2(x)$

$W(u_1(x+a), u_2(x)) = W(A u_1 + B u_2, u_2) =$

$= A \cdot v$

$W(u_1(x+a), u_1(x)) = B(-v)$

$W(u_2(x+a), u_2(x)) = C \cdot v$

$W(u_2(x+a), u_1(x)) = D \cdot (-v)$

$\Rightarrow v = W(u_1(x), u_2(x)) = W(u_1(x+a), u_2(x+a)) = W(A u_1 + B u_2, C u_1 + D u_2) =$

$= AD\, v + BC \cdot (-v) = v(AD - BC) = v$

$\Rightarrow AD - BC = 1$

$\det \begin{pmatrix} A & C \\ B & D \end{pmatrix} = 1$

$\begin{pmatrix} A & C \\ B & D \end{pmatrix} \underbrace{\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}}_{\text{собств.}} = \lambda \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$

$A c_1 + C c_2 = \lambda c_1$

$B c_1 + D c_2 = \lambda c_2$

построим

$\chi(x) = c_1 u_1(x) + c_2 u_2(x)$

$\chi(x+a) = C_1 A \psi_1(x) + C_1 B \psi_2(x) +$
$+ C_2 C \psi_1(x) + C_2 D \psi_2(x)$

Собираем коэф-ты при ψ_1 и ψ_2

$C_1 A + C_2 C = \lambda C_1$
$C_1 B + C_2 D = \lambda C_2$

$\Rightarrow \chi(x+a) = \lambda \chi(x)$
т.е. мы построили решение, к-ое при сдвиге потенциала $\times \lambda$

$\chi_1(x+a) = \lambda_1 \chi_1(x)$

$\chi_2(x+a) = \lambda_2 \chi_2(x)$

$\det\begin{pmatrix} A & C \\ B & D \end{pmatrix} = AD - BC = \boxed{\lambda_1 \cdot \lambda_2 = 1}$

$Tr = (A+D) = \lambda_1 + \lambda_2$

1 случай

$|\lambda_1| \neq 1$; если $|\lambda_1| > 1$, то экспоненц. рост вправо

(зав-ть от номера ячейки)

а χ_2 растет влево

если $|\lambda_1| < 1$, то все наоборот

тогда непр. спектра нет, т.к. нет осциллящий

2 случай

$|\lambda_1| = 1$

$\lambda_1 = e^{i\varphi} = e^{i\frac{pa}{\hbar}}$

$\lambda_2 = e^{-i\frac{p}{\hbar}a}$

p назыв. квазиимпульсом, т.к. это фаза, к-ую приобрет. волн. ф-ия при сдвиге пот-ла.

$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px}$ – для обычного импульса

$\psi_p(x+c) = \psi_p(x) \cdot e^{\frac{i}{\hbar}pc}$
произв. конст.

для квази – импульса

$\chi_1(x+na) = \chi(x) e^{\frac{i}{\hbar}pna}$
не произв. константа

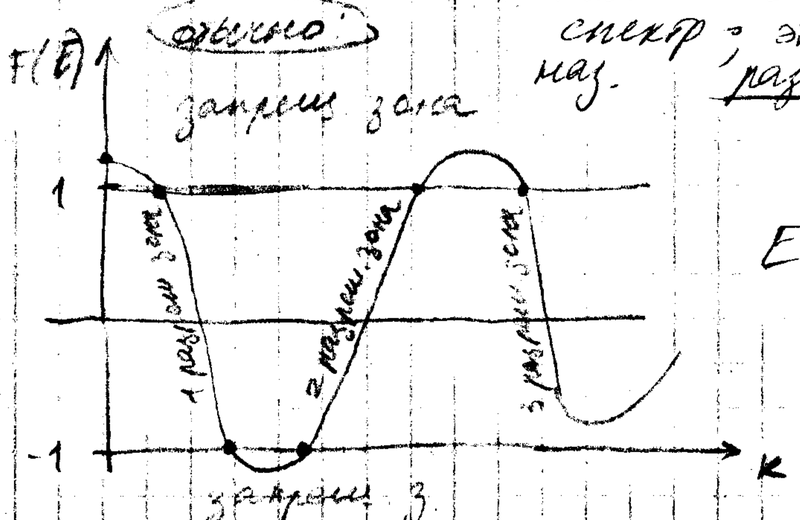
$A(E)$ – ?
$D(E)$ – ?
построим ф-ию

$F(E) = \frac{A(E) + D(E)}{2} = \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2} =$

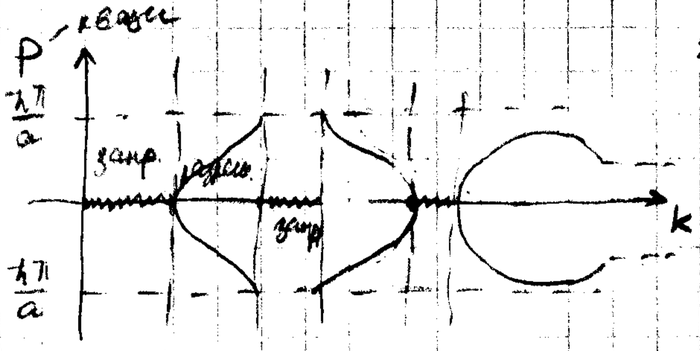
$= \frac{1}{2}\left[e^{\frac{i}{\hbar}pa} + e^{-\frac{i}{\hbar}pa}\right] = \cos\frac{pa}{\hbar}$

$\Rightarrow |F(E)| \leq 1$ – условие разрешенных зон

$\left|\frac{A+D}{2}\right| \leq 1$ в тех областях эн., где это выполн., там есть непр. спектр; эти области наз. разрешенными



$E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$



2 разреш зона шире, чем первая, а 2 запр зона уже, чем 1

$$\cos p\frac{a}{\hbar} = F(E)$$

$F(E) = 1 \Rightarrow p = 0$

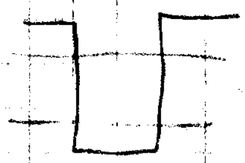
$F(E) = -1 \Rightarrow p = \pm\frac{\hbar\pi}{a}$

$\frac{dp}{dk} \to \infty$ на границах зон

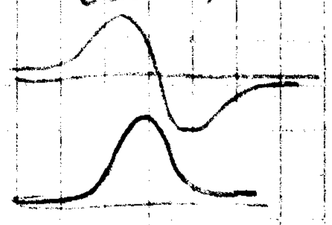
$-\sin p\frac{a}{\hbar} \cdot \frac{dp}{dk} = -\frac{d}{dk}F(E)$

мы док-ли т-му Блоха и построили ее волн. ф-ии

Конечный отрезок период. пот-ла. Механизмы формир зон



- возб. уровень
- осн. уровень



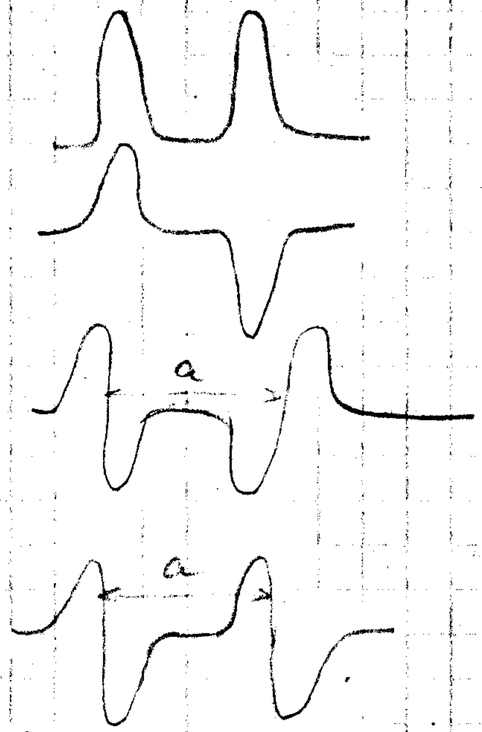
Формируем отрезок период. пот-ла

считаем, что расст. м/у ямами >> хар-ов размера волн ф-ии

Волн. ф-ии осн. сост. $p = 0$

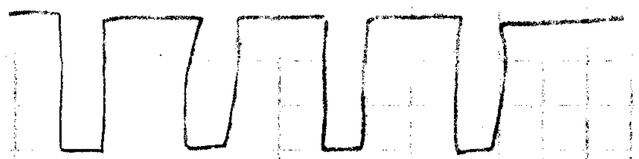
1 возб. уровень $p = \frac{\hbar\pi}{a}$

2 возб. уровень $p = \frac{\hbar\pi}{a}$



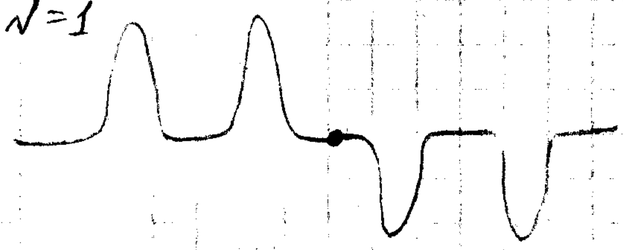
3 возб. уровень $p = 0$

Рассм. 4 ямы

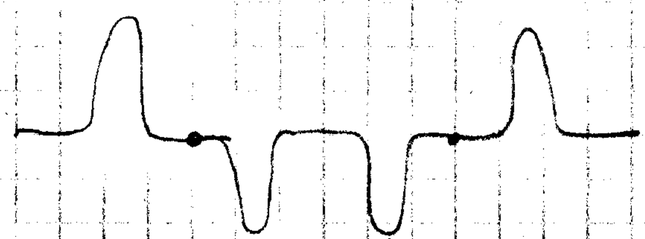


$N = 0$ $p = 0$

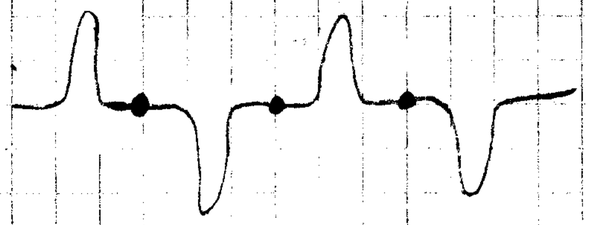
$N = 1$ $p = \frac{\hbar\pi}{2a}$



$N = 2$ $p = \frac{\pi\hbar}{2a}$



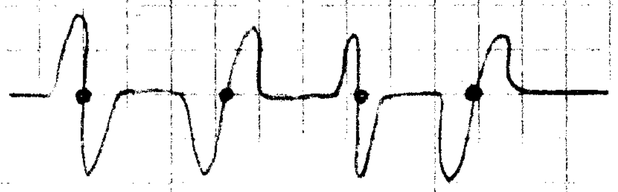
N=3



$p = \frac{\pi\hbar}{a}$

закончилась разреш. зона начиналась 2 зона

N=4

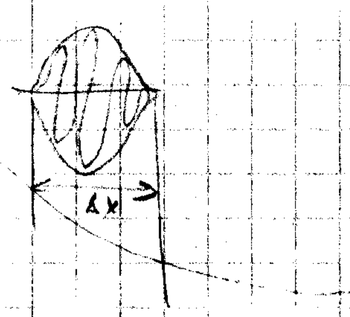


$p = \frac{\pi\hbar}{a}$

при числе ям $\to \infty$ спектр становится непрерывным

Квазиклассическое приближение. ВКБ (WKB)

Рассм. волн. пакет



на расстояниях $\sim \Delta x$ изменение пот. ля $\Delta x \cdot V'(x) \ll V(x)$

квазиклассич. приближ.

Квазиклассич. приближ.

$\lambda \cdot V'(x) \ll V(x)$

$\lambda = \frac{\hbar}{p_0}$

ур. Шр.

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

если $E > V(x)$, то $\frac{2m}{\hbar^2}(E - V) = k^2(x)$

если $E < V(x)$, то $\ldots = -\varkappa^2(x)$

Ищем решение в УШ подст. $\psi(x) = e^{iS(x)}$,

$-(S')^2 + iS'' + k^2(x) = 0$

$iS'' \ll (S')^2$

ищем S в виде

$S = S_0(x) + S_1(x) + \ldots$

$(S_0')^2 = k^2(x) \Rightarrow S_0' = \pm k(x)$

$-(S_0')^2 - 2S_0'S_1' - 0 + iS_0'' + k^2(x) = 0$

$S_1' = \frac{i}{2} \cdot \frac{S_0''}{S_0'} = \frac{i}{2} \cdot \frac{k'(x)}{k(x)}$

$\psi(x) = \exp\left[\pm i \int_{x_0}^{x} k(x)\,dx - \frac{1}{2}\ln k(x)\right] =$

$= \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \exp\left[\pm i \int_{x_0}^{x} k(x)\,dx\right]$ и т.

$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\varkappa(x)}} e^{\pm \int_{x_0}^{x} \varkappa(x)\,dx}$

$(S_0')^2 \gg S_0''$

$(k(x))^2 \gg k'(x)$

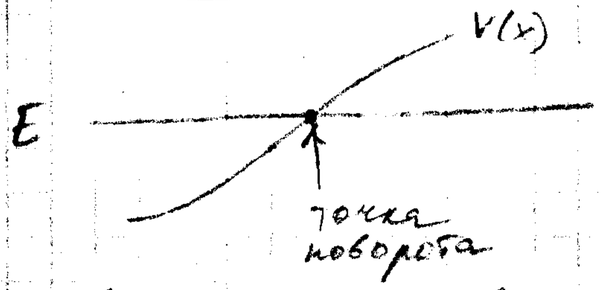
$1 \gg \frac{d}{dx}\left(\frac{1}{k}\right) = \frac{d\lambda}{dx}$

$\lambda \cdot \frac{d\lambda}{dx} \ll \lambda$

приближ. тогда выш.

$$\lambda \sim \frac{1}{k} \sim \frac{1}{\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)}}$$

$$\boxed{\lambda \frac{dV}{dx} \ll V(x)}$$



слева от точки поворота решение

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

справа от точки поворота решение

$$\frac{A'}{\sqrt{k(x)}} e^{i\int k(x)dx} + \frac{B'}{\sqrt{k(x)}} e^{-i\int k(x)dx}$$

Квазикл. непрерыв. в окр-ти т. поворота, резкого макс пот-ла и скачка пот-ла

Лекция 14

7.04.03

в точке поворота $V(x)=E$
перенесем нач. к-т в т. поворота, т.е $V(0)=E$

$$V(x) = V(0) + V'(0)\cdot x + V''(0)\cdot\frac{x^2}{2} + \dots$$

$\exists$ область в окр-ти т поворота, в кот. потенциал можно считать линейным

$$x \ll \frac{V'(0)}{V''(0)}$$

внутри этой области

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

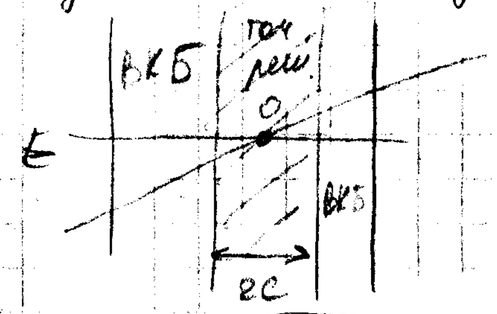
k и $\varkappa$ зависят от $|x|$, $\sim \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}V'|x|}$
при $x>0$ речь идет о $\varkappa$
при $x<0$ речь идет о k

$$\lambda = \frac{1}{k} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mV'}}\cdot\frac{1}{\sqrt{|x|}}$$

$$\frac{d\lambda}{dx} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mV'}}\cdot\frac{1}{|x|^{3/2}} \ll 1$$

$$|x| \gg \left(\frac{\hbar^2}{2mV'}\right)^{1/3} = C$$

входит $\hbar^{2/3}$ $\Rightarrow$ существенно квантовая величина



обозн. $x \equiv C z$
область ВКБ

$z \gg 1$

$$\psi'' - \frac{2m}{\hbar^2}V' z\, C^3 \psi = 0$$

$$\psi'' - z\psi = 0$$

$$\psi = \sum_n C_n z^n$$

$$\sum_n C_n\, n(n-1)\, z^{n-2} - C_n z^{n+1} = 0$$

$$n \to n+3$$

$$\sum_n C_{n+3}\,(n+3)(n+2)\, z^{n+1} - C_n z^{n+1} = 0$$

$$C_{n+3} = C_n \Big/ [(n+3)(n+2)]$$

$\Rightarrow \exists 2$ лин. незав. реш.:

$$F_1 = C_0 + C_3 z^3 + C_6 z^6 + \dots$$

произв. константа

$$F_2 = C_1 z + C_4 z^4 + C_7 z^7 + \dots$$

ф-ия Бесселя $\quad J_\nu(y) = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{y}{2}\right)^{2k+\nu} \frac{(-1)^k}{k!}\, \Gamma(k+\nu+1)$

ф-ия Инфельда $\quad I_\nu(y) = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{y}{2}\right)^{2k+\nu} \frac{1}{k!\,\Gamma(k+\nu+1)}$

$$F_1(z>0) = \sqrt{|z|}\cdot I_{-1/3}\left(\tfrac{2}{3}|z|^{3/2}\right)$$

$$[x\cdot\Gamma(x) = \Gamma(x+1)]$$

$$F_2(z>0) = \sqrt{|z|}\; I_{1/3}\left(\tfrac{2}{3}|z|^{3/2}\right)$$

аналогично

$$F_1(z<0) = \sqrt{|z|}\cdot J_{-1/3}\left(\tfrac{2}{3}|z|^{3/2}\right)$$

$$F_2(z<0) = -\sqrt{|z|}\; J_{\frac{1}{3}}\left(\tfrac{2}{3}|z|^{3/2}\right)$$

$|z| \gg 1$ $\qquad J_\nu(y\to\infty) = \sqrt{\frac{2}{\pi y}}\cos\left(y - \frac{\pi\nu}{2} - \frac{\pi}{4}\right)$

$$I_\nu(y) + I_{-\nu}(y) = \sqrt{\frac{2}{\pi y}}\, e^{y}$$

$$I_{-\nu}(y) - I_\nu(y) = \sqrt{\frac{2}{\pi y}}\,\sin\pi\nu\cdot e^{-y}$$

$$(F_1+F_2)\Big|_{z\gg 1} = \cancel{\sqrt{z}}\cdot\sqrt{\frac{\cancel{2}}{\pi\,\frac{\cancel{2}}{3}|z|^{3/2}}}\cdot e^{\frac{2}{3}|z|^{3/2}}$$

$$(F_1+F_2)\Big|_{z\ll -1} = \sqrt{\frac{3}{\pi\sqrt{|z|}}}\cdot\left[\cos\left(\tfrac{2}{3}|z|^{3/2} + \tfrac{\pi}{6} - \tfrac{\pi}{4}\right) - \cos\left(\tfrac{2}{3}|z|^{3/2} - \tfrac{\pi}{6} - \tfrac{\pi}{4}\right)\right] =$$

$$= \sqrt{\frac{3}{\pi\sqrt{|z|}}}\cdot 2\cdot\sin\frac{\pi}{6}\cdot\left[-\sin\left(\tfrac{2}{3}|z|^{3/2} - \tfrac{\pi}{4}\right)\right] =$$

$$= \sqrt{\frac{3}{\pi\sqrt{|z|}}}\cos\left[\tfrac{2}{3}|z|^{3/2} + \tfrac{\pi}{4}\right]$$

$$\varkappa(z),\ k(z) \sim \sqrt{|z|}$$

$$\tfrac{2}{3}|z|^{3/2} \nearrow \int_0^z \sqrt{|z|}\,dz \qquad z>0$$

$$\searrow \int_z^0 \sqrt{|z|}\,dz \qquad z<0$$

! $\frac{1}{\sqrt{k}}\cos\left[\int_z^0 k\,dz + \frac{\pi}{4}\right] \longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{\varkappa}}\exp\left[\int_0^z \varkappa\,dz\right]$

в разреш. зоне $\qquad$ в запреш. зоне

$$(F_1 - F_2)\Big|_{z\gg 1} = \sqrt{\frac{3}{\pi\sqrt{|z|}}}\,\sin\frac{\pi}{3}\cdot\exp\left[-\tfrac{2}{3}|z|^{3/2}\right]$$

$$(F_1 - F_2)\Big|_{z\ll -1} = \sqrt{\frac{3}{\pi\sqrt{|z|}}}\cdot 2\cdot\cos\left[\tfrac{2}{3}|z|^{3/2} - \tfrac{\pi}{4}\right]\cdot\cos\frac{\pi}{6} = \frac{1}{\sqrt[4]{|z|}}\sin\left[\tfrac{2}{3}|z|^{3/2} + \tfrac{\pi}{4}\right] \longleftrightarrow$$

! $\longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt[4]{|z|}}\exp\left[-\tfrac{2}{3}|z|^{3/2}\right]$

$$\frac{1}{\sqrt{k}}\sin\left[\int_z^0 k\,dz+\frac{\pi}{4}\right] \longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{\varkappa}}\exp\left[-\int_0^z \varkappa\,dz\right]\cdot\frac{1}{2}$$

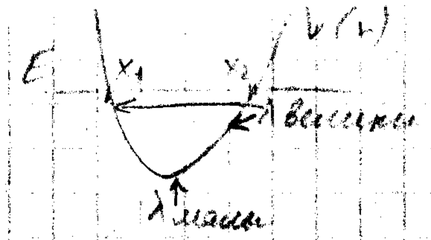
2 условие сшивания в окр-ти точки поворота

$$\frac{1}{\sqrt{\varkappa(x)}}\,e^{\int_x^{x_1}\varkappa(x)dx} \longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{k(x)}}\cos\left[\int_{x_1}^{x}k(x)dx+\frac{\pi}{4}\right]$$

$$\frac{1}{\sqrt{\varkappa(x)}}\,e^{-\int_x^{x_1}\varkappa(x)dx}\cdot\frac{1}{2} \longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{k(x)}}\sin\left[\int_{x_1}^{x}k(x)dx+\frac{\pi}{4}\right]$$

Применение классических формул

1) Квантование Бора-Зоммерфельда



$$\frac{d\lambda}{dx} \ll 1$$

$\Updownarrow$

λ много

$\Updownarrow$

у ψ много корней

$\Updownarrow$

у ψ большой порядок

$\Downarrow$

Квазиклас. приближ позволяет искать только высокие уровни энергии

слева

$$\frac{1}{2}\,\frac{1}{\sqrt{\varkappa}}\,e^{-\int_x^{x_1}\varkappa\,dx}$$

$\updownarrow$

$$\frac{1}{\sqrt{k}}\sin\left(\int_{x_1}^{x}k\,dx+\frac{\pi}{4}\right)$$

справа

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

$\updownarrow$

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

$$=\frac{1}{\sqrt{k}}\sin\left[\int_{x_1}^{x_2}k\,dx-\int_{x_1}^{x}k\,dx+\frac{\pi}{4}\right]=$$

$$=-\frac{1}{\sqrt{k}}\sin\left[\int_{x_1}^{x}k\,dx-\frac{\pi}{4}-\int_{x_1}^{x_2}k\,dx\right]$$

условие сшивания этих синусов $\Leftrightarrow$ их фаза отлич. на πn

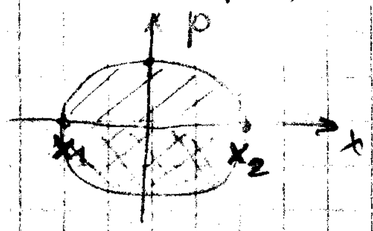
$$\frac{\pi}{4}=-\frac{\pi}{4}-\int_{x_1}^{x_2}k\,dx+\pi n+\pi$$

$$\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(x))}\,dx=\pi\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

$$\int_{x_1}^{x_2}\underbrace{\sqrt{2m(E-V(x))}}_{p(x)}\,dx=\pi\hbar\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

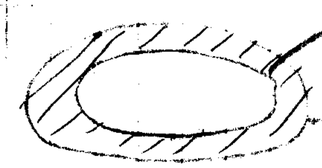
квазиклассич. ф-ла

$$\boxed{\oint p(x)\,dx=2\pi\hbar\left(n+\frac{1}{2}\right)}$$



верно тогда и т.т. достаточно велико, т.е. $p_{max}^2 \gg p'$, n - тоже достат. велико ($n \gg 1$)

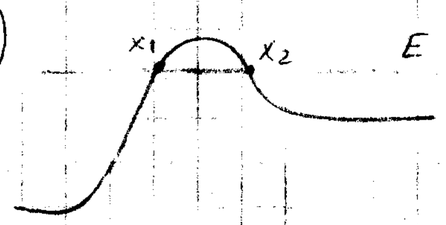
фазовые кривые:



площадь заштрих. равна $2\pi\hbar$

у этой ф-лы нет физ. смысла, т.к. x и p не коммутируют

2)



Туннелирование сквозь потенц. барьер

условие: $k^2 \gg k'$ $\Rightarrow$ $\int_{x_1}^{x_2}\varkappa\,dx \gg 1$

$$\mathcal{D} = \exp\left[-\int_{x_1}^{x_2} \varkappa dx\right] \ll 1$$

надо построить ψ со след. асимптотиками

при $x \to -\infty$ $\quad e^{ik_- x} + \gamma e^{-ik_- x}$

при $x \to +\infty$ $\quad e^{ik_+ x}$

$$k_+ x \sim \int_{x_2}^{x} k(x)dx \quad \text{(с точностью до const)}$$

$$k(x)\big|_{x\to\infty} \to k_+ \quad \left(\int_{x_2}^{x} k(x)dx = k_+ x + \text{const}\right)$$

$$\int_{x}^{x_1} k(x)dx = -k_- x + \text{const}$$

обозначим $\psi_1 \sim \cos\left[\int_{x_2}^{x} k dx + \frac{\pi}{4}\right]$

$$\psi_2 \sim \sin\left[\int_{x_2}^{x} k dx + \frac{\pi}{4}\right]$$

$$\psi_1 + i\psi_2 \sim \exp\left[i\int_{x_2}^{x} k dx + i\frac{\pi}{4}\right]$$

$$\psi_1 + i\psi_2\big|_{x\to+\infty} \sim \exp\left[ik_+ x + i\varphi_1\right]$$

какая-то фаза

между x_1 и x_2:

$$\psi_1 \sim \exp\left[\int_{x_2}^{x} \varkappa(x)dx\right] =$$

$$= \exp\left[-\int_{x_1}^{x} \varkappa dx + \int_{x_1}^{x_2} \varkappa dx\right] =$$

$$= \frac{1}{2}\exp\left[-\int_{x_1}^{x} \varkappa dx\right] \mathcal{D}^{-1/2}$$

при $x \to -\infty$

$$\psi_1 \sim \sin\left[\int_{x}^{x_1} k dx + \frac{\pi}{4}\right] \cdot \frac{2}{\mathcal{D}}$$

Лекция 15

14.04.04

$$\mathcal{D} = e^{-\int_{x_1}^{x_2} \varkappa(x)dx} \ll 1$$

$$\frac{1}{\sqrt{\varkappa}} \sin\left[\int_{x}^{x_1} k dx + \frac{\pi}{4}\right] \cdot \frac{2}{\mathcal{D}}$$

$$\int_{x_2}^{x} k dx\Big|_{x\to\infty} = kx + \text{const}$$

$$k(+\infty) = k(-\infty) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}$$

$$\int_{x_2}^{x} k dx + \frac{\pi}{4}\Big|_{x\to+\infty} = kx + \underbrace{\varphi_2}_{\text{нек. конст.}}$$

$$\int_{x}^{x_1} k dx + \frac{\pi}{4}\Big|_{x\to-\infty} = -kx - \underbrace{\varphi_1}_{\text{нек. конст.}}$$

$$\psi_1\big|_{x\to-\infty} = \frac{1}{\sqrt{k}} \sin(-kx - \varphi_1) \cdot \frac{2}{\mathcal{D}}$$

Сведем

$$\psi_1(x\to+\infty) = \frac{1}{\sqrt{k}} \cos(kx + \varphi_2)$$

аналогично построим ψ_2

$$\psi_2(x\to-\infty) = \frac{1}{\sqrt{k}} \cos(-kx - \varphi_1) \cdot$$

$$\psi_2(x\to+\infty) = \frac{1}{\sqrt{k}} \sin(kx + \varphi) \cdot \frac{2}{\mathcal{D}}$$

построим $\quad \psi = \sqrt{k}\left(\psi_1 + \frac{\mathcal{D}}{2} i\psi_2\right)$

это не $k(x)$, а $k(+\infty) = k(-\infty)$

$$\cos(kx+\varphi) + i\sin(kx+\varphi)$$

$$\psi(x\to+\infty) = \exp\left[ikx + i\varphi_2\right]$$

$$\psi(x\to-\infty) = \frac{1}{\mathcal{D}}(-i)e^{-ikx-i\varphi_1} + \frac{1}{\mathcal{D}} \cdot i e^{ikx+i\varphi_1} +$$

$$+ \frac{\mathcal{D}}{4} i e^{ikx-i\varphi_1} + \frac{\mathcal{D}}{4} i e^{ikx+i\varphi_1} = e^{ikx} e^{i\varphi_1} \cdot$$

$$\cdot i\left[\frac{1}{\mathcal{D}} + \frac{\mathcal{D}}{4}\right] + e^{-ikx} e^{-i\varphi_1} \cdot i \cdot \left[-\frac{1}{\mathcal{D}} + \frac{\mathcal{D}}{4}\right]$$

$$T = \left[\frac{1}{D} + \frac{D}{4}\right]^{-2} = \frac{D^2}{(1+D^2/4)^2}$$

$$R = \frac{(1-D^2/4)^2}{(1+D^2/4)^2} \qquad \boxed{T+R=1}$$

но наш ответ верен, когда $D \ll 1$, поэтому:

$$T = D^2 = \exp\left[-2\int_{x_1}^{x_2} \varkappa(x)\,dx\right]$$

$$R = 1 - D^2 \approx 1$$

3-х мерное движение материальной точки

замена $\hat{x} \to \hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3$

$\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$

$\downarrow$

$\hat{\vec{x}}$

$$\hat{\vec{x}}\,|\vec{x}\rangle = \vec{x}\,|\vec{x}\rangle$$

если $\vec{x}$ невырожд., то это 3х мерн. движ. в противном случае есть, например, спин

$$\hat{x}_1\,|x_1, x_2, x_3\rangle = x_1\,|x_1, x_2, x_3\rangle$$

спектр $\hat{x}_1$ вырожден, а спектр $\{\hat{x}_1; \hat{x}_2; \hat{x}_3\}$ невырожден

$$\psi(\vec{x}) = \langle\vec{x}|\psi\rangle$$

$$\hat{\vec{x}}\,\psi(\vec{x}) = \vec{x}\,\psi(\vec{x})$$

$$[x_i; p_j] = i\hbar\delta_{ij} \Rightarrow p_1 = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx_1}$$

p_2, p_3 — " —

$$\Rightarrow \vec{p} = \frac{\hbar}{i}\cdot\vec{\nabla}$$

аналогично можно ввести импульсное представление с помощью ф-ии

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

физ. смысл $\int_V |\psi(x)|^2 \underbrace{d\vec{x}}_{d^3x} = P_V$ — вер-ть пребывания внутри объема V

условие нормировки:

$$\int_{R^3} d\vec{x}\cdot|\psi|^2 = 1$$

Уравнение непрерывности

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi\rangle = H|\psi\rangle$$

$$\frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x})$$

$$i\hbar\frac{d}{dt}\psi(\vec{x},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\cdot\psi \qquad |\cdot\psi^*$$

комплексно сопрягаем

$$-i\hbar\frac{d}{dt}\psi^* = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi^* + \overset{=V^*}{V}\psi^* \qquad |\psi$$

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi|^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^*\right) =$$

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

$$\boxed{\frac{d}{dt}\rho(\vec{x},t) + \bar{\nabla}\bar{\jmath}(\vec{x},t) = 0}$$ — диф-ый 3х мерный з-н

$$\rho(\vec{x},t) = |\psi(x,t)|^2$$

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

Пусть ψ - стацз. сост.

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \cdot |\psi(0)\rangle$$

$$\frac{d}{dt}\rho(\vec{x},t) \equiv 0$$

$$\operatorname{div}\vec{j} = 0$$

Возьмем нек. объем V с границей S и проинтегрируем по нему

$$\int_V \operatorname{div} j \, dv = \int_S j \, dS = 0$$

В потенциале $-\frac{A}{r^2}$ такой переход незаконный

$\Rightarrow$ интегральный з-н сохр. вер-ти:

$$\boxed{\frac{d}{dt}P_V = -\int_S j \, dS}$$, когда потенциал несингулярный

Почти классическое движение: выполнен закон Ньютона, частица «теряет» импульс

Перейдем в представление Гейзенберга

$$\frac{dx_1}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, x_1] = \frac{i}{\hbar}\left[\frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{p_3^2}{2m} + V(\vec{x}), x_1\right] =$$

$$\begin{cases} [V(\vec{x}), x_1] = 0 \\ p_{2,3} \text{ коммутирует с } x_1 \end{cases}$$

$$= \frac{i}{\hbar}\frac{1}{2m}\left[\hat{p}_1[\hat{p}_1, \hat{x}_1] + [\hat{p}_1, \hat{x}_1]\hat{p}_1\right] =$$

$$= \frac{\hat{p}_1}{m} = \frac{d}{dt}\hat{x}_1$$

аналогично $\frac{d}{dt}p_1 = -\frac{d}{dx_1}V(\vec{x}) = f_{x_1}(\vec{x})$

$$\frac{d}{dt}\vec{x} = \frac{\vec{p}}{m} \; ; \; \frac{d}{dt}\vec{p} = -\vec{\nabla}V = \vec{f}$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d}{dt}\langle\vec{x}\rangle = \frac{\langle\vec{p}\rangle}{m}}$$

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle\vec{p}\rangle = \langle -\vec{\nabla}V\rangle} \neq -\vec{\nabla}\langle V\rangle$$

Т. Эренфеста верна тогда и только тогда, когда

$\delta x_1 = \sqrt{\mathcal{D}x_1} \ll \langle x_1\rangle$

$\delta p_1 = \sqrt{\mathcal{D}p_1} \ll \langle p_1\rangle$

$\Rightarrow$ применима только к почти классическим

$$\psi(\vec{x}) = \frac{1}{(\sqrt{\pi}\Delta x)^{3/2}} \cdot \exp\left[-\frac{(\vec{x}-\vec{x}_0)^2}{2\Delta x^2} + \frac{i}{\hbar}\vec{p}_0\vec{x}\right]$$

Квазиклассическое приближение

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

ищем реш. в виде

$$\psi = e^{iS(\vec{x})}$$

подставим, получим

$$-(\nabla S)^2 + \underbrace{i\Delta S}_{\text{мелкая}} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-V) = 0$$

ограничимся нулевым приближением

$$(\bar\nabla S)^2 = k^2(x) = \frac{2m}{\hbar^2}(E-V)$$

восстановить S по модулю ее градиента невозможно!
Но $\exists$ ситуации, в к-ых из этого выражения можно извлечь пользу

1) $\bar\nabla S \parallel \vec x$, то интегрируем вдоль по радиус-вектору от нач. к-т

это случай, когда V в каком-то приближ. сферич. симметричный

2) одномерный вдоль оси z
напр., распр. волны вдоль z

$$S(x,y,z_2) - S(x,y,z_1) = \int_{z_1}^{z_2} dz\, k(x,y,z)$$

Уравнения Гамильтона-Якоби

Речь идет о волновом пакете

$$i\hbar \frac{d}{dt}\psi(\vec x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V(\vec x)\psi(\vec x,t)$$

$$\psi(\vec x,t) = e^{\frac{i}{\hbar}S(\vec x,t)} \cdot A(\vec x,t)$$

$$\frac{d}{dt}\psi = \cancel{\dot A e^{\frac{i}{\hbar}S}} + A\frac{i}{\hbar}\dot S e^{\frac{i}{\hbar}S}$$

(пренебрег., т.к. работаем в квазиклас. прибл.)

подст. в УШ

$$i\hbar\frac{i}{\hbar}\dot S A e^{\frac{i}{\hbar}S} + 0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\cdot$$

$$\cdot\left[-\frac{1}{\hbar^2}(\bar\nabla S)^2 + \underbrace{\cdots}_{0 \text{ пренебр}}\right]\cdot A e^{\frac{i}{\hbar}S} + V\cdot A\cdot e^{\frac{i}{\hbar}S}$$

$$\boxed{-\dot S = \frac{(\bar\nabla S)^2}{2m} + V(\vec x)}$$ — ур-ие Г.-Я.

$$\rho = |\psi|^2 = A^2$$

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

$$= \frac{\hbar}{2mi}\cdot A^2\cdot\frac{i}{\hbar}\vec\nabla S\cdot 2 = \frac{\bar\nabla S}{m}A^2 = \bar v A^2$$

ск-ть движения ч-цы

Лекция 16

20.04.04

Вариационный принцип Ритца

Если потенциал представим

$$V(\bar x) = V(x_1) + V(x_2) + V(x_3)$$

$$\psi(x) = \psi(x_1)\cdot\psi(x_2)\cdot\psi(x_3)$$

Если $V = V(r)$

$$\psi(\bar x) = R(r)\,Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

Определим функционал

$$\Phi[|\psi\rangle] = \langle\psi|\hat H|\psi\rangle$$

(T) Условный экстремум этого ф-ла при условии $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ — решение ур. Шр.

$$\tilde{\Phi} = \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle - \lambda(\langle\psi|\psi\rangle - 1)$$

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

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

почему диф. только по $\langle\psi|$?

$$\langle\psi|H|\psi\rangle = \int d\bar{x}\, \psi^*(x)\hat{H}\psi(x)$$

$$\frac{\delta}{\delta\langle\psi|} \Leftrightarrow \frac{\delta}{\delta\psi^*} \qquad \frac{\delta}{\delta|\psi\rangle} \Leftrightarrow \frac{\delta}{\delta\psi}$$

т.к. $\langle\psi|$ и $|\psi\rangle$ независ., то ψ^* и ψ - независ.

Придумываем подходящую вол. ф-ию $\psi_{\text{авс}}(\bar{x})$ параметры

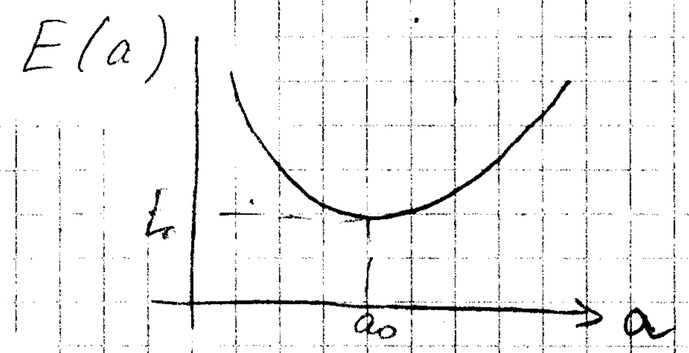
$$E(a,b,c\ldots) = \int dx\, \psi^*_{ab}(x) H \psi_{ab}(x)$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

если у нас ангармонич. осц-р, то берем

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

$$E(a) = \int dx\, \psi_a(x)\Big[\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}}_{\sim\frac{1}{a^2}} + V(x)\Big]\cdot\psi_a(x)$$



удобно искать min ф-ла:

$$\frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

Теория моментов.

Моментом назыв. оператор с компонентами l_1, l_2, l_3, которые удовл.:

$$[l_i; l_j] = i\,\varepsilon_{ijk}\, l_k$$

напр., $[l_x; l_y] = i\, l_z$

$$l^2 = l_1^2 + l_2^2 + l_3^2$$

$$[l_i; l^2] = 0$$

$$\hat{l}^2|lm\rangle = l(l+1)|lm\rangle \quad \text{(обозначение)}$$

$\hat{l}^2$ - оператор с положит. спектром

$$\hat{l}_z|lm\rangle = m|lm\rangle$$

$\Rightarrow$ момент - то, для чего l^2 и l_z явл. полным набором наблюдаемых

$$\langle l'm'|lm\rangle = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

Моменты наз. независимыми, если все их компоненты коммутируют м/у собой

если $\vec{l}^{(1)}$ и $\vec{l}^{(2)}$ - моменты, то $\vec{l} = \vec{l}^{(1)} + \vec{l}^{(2)}$ - момент

Матричные элементы оператора момента

$l_x, l_y \to l_+ = l_x + i l_y$

$l_- = l_x - i l_y$

$[l_\pm ; l^2] = 0$

$[l_z ; l_+] = + l_+ \qquad [l_z ; l_-] = - l_-$

$|\chi\rangle = l_+ |lm\rangle$

$l^2 |\chi\rangle = l^2 l_+ |lm\rangle =$

$= l_+ l^2 |lm\rangle = l(l+1) l_+ |lm\rangle =$

$= l(l+1) |\chi\rangle$

$l_z |\chi\rangle = l_z l_+ |lm\rangle =$

$= l_+ l_z |lm\rangle + l_+ |lm\rangle = (m+1) l_+ |lm\rangle$

$|\chi\rangle = N |l\, m+1\rangle$

аналогично $l_- |lm\rangle = \tilde{N} |l\, m-1\rangle$

$\langle\chi|\chi\rangle = |N|^2 \langle l\, m+1 | l\, m+1\rangle =$

$= |N|^2$

с др. стороны

$\langle\chi|\chi\rangle = \langle lm | l_+^+ l_+ | lm\rangle =$

$= \langle lm | (l_1 - i l_2)(l_1 + i l_2) | lm\rangle =$

$= \langle lm | l_1^2 + l_2^2 + l_3^2 - l_3^2 + i(\underbrace{l_1 l_2 - l_2 l_1}_{[l_1, l_2] = i l_3}) | lm\rangle$

$= (l(l+1) - m^2 - m) \langle lm | lm\rangle =$

$= l^2 - m^2 + l - m = (l-m)(l+m+1) = |N|^2$

$$\boxed{l_+ |lm\rangle = e^{i\varphi} \sqrt{(l-m)(l+m+1)}\, |l\, m+1\rangle}$$

будем считать, что $e^{i\varphi} = 1$

$\langle l\, m+1 | l_+ | l_m\rangle = \sqrt{(l-m)(l+m+1)}$

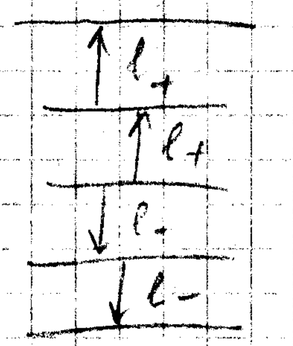
$\langle lm | l_+^+ | l\, m+1\rangle =$ — " —

l_+ — не эрм. оператор

$l_+^+ = l_-$

$l_- |l\, m+1\rangle =$ — " — $|lm\rangle$

$l_- |lm\rangle = \sqrt{(l+m)(l-m+1)}\, |l\, m-1\rangle$



$|l\, m+2\rangle$

$|l\, m+1\rangle$

$|lm\rangle$

$|l\, m-1\rangle$

$|l\, m-2\rangle$

$l^2 \to l(l+1)$

$\underbrace{l_1^2 + l_2^2}_{\text{оператор с неотриц. спектром}} + \underbrace{l_3^2}_{m^2}$ $\Rightarrow$ m не может неогранич. расти ни вверх, ни вниз, т.к. $m^2 \le l(l+1)$

$\Rightarrow$ цепочка должна где-то оборваться

цепочка вверх обрывается, когда $l = m$,

т.е. $\exists\, m_{max} = l$

тогда $\hat{l}_+ |lm_{max}\rangle = \sqrt{(l-l)(l+l+1)}\ldots = 0$

аналогично

$\exists m_{min} = -l \qquad \hat{l}_- |lm_{min}\rangle = \sqrt{(l-l)\ldots\ldots} = 0$

$\Rightarrow -l \le m \le l$, кроме единицы

$l = \frac{k}{2}$, k - целое

для $\pm l$ $\exists$ $2l+1$ значение m

1) $S = \frac{1}{2}$

$\vec{S} = \frac{1}{2}\vec{\sigma}$ $\qquad |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ $\qquad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$

$S_z |\uparrow\rangle = \frac{1}{2}|\uparrow\rangle$

$S_z |\downarrow\rangle = -\frac{1}{2}|\downarrow\rangle$

$S^2 = \frac{1}{4}\sigma_1^2 + \frac{1}{4}\sigma_2^2 + \frac{1}{4}\sigma_3^2 = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)$

то есть l

$|\uparrow\rangle = |l = \frac{1}{2};\ m = \frac{1}{2}\rangle$

$|\downarrow\rangle = |l = \frac{1}{2};\ m = -\frac{1}{2}\rangle$

2) $\vec{l} = \frac{1}{\hbar}\left[\underbrace{\vec{x} \cdot \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}}_{\text{векторное произведение}}\right] = \frac{1}{i}\left[\vec{e}_r r \cdot \left(\vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\right] =$

$= \frac{1}{i}\left[l_\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - l_\theta \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right] = \vec{e}$

можно показать, что

$l_z = \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$

$l^2 = -\Delta_{\theta\varphi} = -\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) - \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$

$\hat{l}^2\, e^{im\varphi} P_l^{|m|}(\cos\theta) = l(l+1)\, e^{im\varphi} P_l^{|m|}(\cos\theta)$

$\hat{l}_z\, e^{im\varphi} P_l^{|m|}(\cos\theta) = m \cdot e^{im\varphi} \cdot P_l^{|m|}(\cos\theta)$

$|lm\rangle = e^{im\varphi} \cdot P_l^{|m|}(\cos\theta) \cdot N = Y_{lm}(\theta,\varphi)$

нормировка

$N = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \sqrt{\frac{2l+1}{2}} \cdot \sqrt{\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \cdot$

$\cdot \underbrace{\begin{cases} (-1)^m & m > 0 \\ 1 & m \le 0 \end{cases}}_{\text{фазовый множитель}}$

$\int d_\perp\Omega\ Y^*_{l'm'}(\theta,\varphi)\, Y_{lm}(\theta,\varphi) = \langle l'm'|lm\rangle =$

$= \delta_{ll'}\,\delta_{mm'}$

$e^{i l_z \varphi}$ - поворот на угол φ вокруг оси z

$e^{i l_z \varphi} \cdot l_z\, e^{-i l_z \varphi} = l_z$

$$e^{i l_z \varphi} l_x e^{i l_z \varphi} = l_x + [i l_z \varphi l_x] - \varphi l_y + \frac{1}{2!}\underbrace{[l_z \varphi; -\varphi l_y]}_{-\varphi^2 l_x} +$$

$$+\frac{1}{3!}\varphi^3 l_y = l_x\left[1 - \frac{\varphi^2}{2!} + \dots\right] - l_y\left[\varphi - \frac{\varphi^3}{3!} + \dots\right] = l_x \cos\varphi - l_y \sin\varphi$$

аналогично

$$e^{i\varphi l_z} l_y e^{-i\varphi l_z} = l_y \cos\varphi + l_x \sin\varphi$$

$e^{i\vec{n}\vec{l}\varphi}$ - унит. оператор, вращающий вокруг оси $\vec{n}$ на угол φ

Лекция 17

21.04.04

унитарное преобр.

$$e^{i\varphi S_z} = e^{i\varphi \frac{1}{2}\sigma_3} = e^{i\varphi\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}} = \begin{pmatrix} e^{i\varphi/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi/2}\end{pmatrix} = \begin{cases} 1, & 4\pi, 8\pi \dots \\ -1 & 2\pi, 6\pi \dots \end{cases}$$

$$e^{i\varphi S_z} \vec{S} e^{-i\varphi S_z} = \vec{S} \quad 2\pi, 4\pi, 6\pi, 8\pi, \dots$$

$$e^{i\varphi S_z}|\psi\rangle = \begin{cases} |\psi\rangle, & 4\pi, 8\pi \\ -|\psi\rangle, & 2\pi, 6\pi \end{cases}$$

Классификация операторов с помощью преобразований.

$$e^{i\varphi l_z} x_1 e^{-i\varphi l_z} = x_1 \cos\varphi - x_2 \sin\varphi$$

$$e^{i\varphi l_z} A_1 e^{-i\varphi l_z} = A_1 \cos\varphi - A_2 \sin\varphi$$

$$[l_z; A_1] = A_2$$

$$[l_z; A_2] = -A_1$$

A_1, A_2, A_3 $\quad [l_i; A_j] = i\varepsilon_{ijk} A_k$

в квантовой механике векторами называется оператор, удовлетв.

$$[l_i; A_j] = i\varepsilon_{ijk} A_k$$

скаляром назыв. объект, который при повороте не меняется

$$[l_i; B] = 0$$

Эти определения относительны

кадр у нас есть частица со спином

$l_i \sim \frac{\partial}{\partial \varphi}, \frac{\partial}{\partial \theta}$, S_i

т.е. $[l_i, p_j] = i \varepsilon_{ijk} p_k$

импульс

$$[S_i, p_j] = 0$$

$\Rightarrow$ с точки зрения орбит момента импульс - вектор, а т. зр. спина — скаляр

$$[S_i, S_j] = i \varepsilon_{ijk} S_k$$

можно дав абсолютное определение нужно ввести оператор, к-ый будет поворач. и орбит. и спин. сост. свободы

$$\vec{J} = \vec{l} + \vec{S}$$

$$[J_i, p_j] = i \varepsilon_{ijk} p_k$$

$$[J_i, S_j] = i \varepsilon_{ijk} S_k$$

ψ-ция со спином $1/2$ - классич. составная сост., сост. из точки и спина $1/2$

волн. ф-ии $|\psi_n\rangle |\uparrow\rangle$

или $|\psi\rangle |\downarrow\rangle$

$\Rightarrow$ $\forall$ волн. ф-ия, соотв. частицу со сп

$$|\psi\rangle = \sum_n \underbrace{b_n |\psi_n\rangle}_{|\psi_1\rangle} |\uparrow\rangle + \underbrace{b_n |\psi_n\rangle}_{|\psi_2\rangle} |\downarrow\rangle)$$

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \psi_2(x) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix}$$

$$\int d\bar{x} \left(|\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2 \right) = 1$$

(нормировка)

Сложение моментов

есть составная система

$l = l_1$ $\quad$ $l = l_2$ $\quad$ считаем $l_1 \geq l_2$

базис $|l_1 m_1\rangle |l_2 m_2\rangle$

$-l_1 \leq m_1 \leq l_1$ $\quad$ $-l_2 \leq m_2 \leq l_2$

размерность базиса $(2l_1+1)(2l_2+1)$

Построим векторную сумму

$\vec{L} = \vec{l}^{(1)} + \vec{l}^{(2)}$

$L^2 |LM\rangle = L(L+1) |LM\rangle$

$L_z |LM\rangle = M |LM\rangle$

$$|LM\rangle = \sum_{m_1, m_2} \underbrace{C^{L l_1 l_2}_{M m_1 m_2}}_{\text{коэф-ты Клебша-Гордона}} \cdot |l_1 m_1\rangle |l_2 m_2\rangle$$

задача сложения моментов — задача о нахождении с

$L_z |l_1 m_1\rangle |l_2 m_2\rangle = (l_z^{(1)} + l_z^{(2)}) |l_1 m_1\rangle |l_2 m_2\rangle$

$l_z^{(1)}$ действует только на $|l_1 m_1\rangle$

$l_z^{(2)}$ — и — $|l_2 m_2\rangle$

$= (m_1 + m_2) |l_1 m_1\rangle |l_2 m_2\rangle$

$\Rightarrow$ сумма идет не по всем баз. векторам, а только по тем, у которых $m_1 + m_2 = M$

$\Rightarrow C^{L l_1 l_2}_{M m_1 m_2} \equiv 0$ при $M \neq m_1 + m_2$

возьмем $l_1 = 2$, $l_2 = 1$

$|2\ 2\rangle^{l_1 m_1} |1\ 1\rangle^{l_2 m_2}$

$L_z |2\,2\rangle |1\,1\rangle = 3 |2\,2\rangle |1\,1\rangle$

$\Rightarrow L = 3$, $M = 3$ (интуитивно)

д-во:

пусть есть $|4\rangle$: $L_z |4\rangle = L |4\rangle$

$L_+ |4\rangle = 0$

$\Downarrow$

$|4\rangle \equiv$ старший вектор

$|4\rangle = |L\ M{=}L\rangle$

$L_+ |2\,2\rangle |1\,1\rangle = 0$

$|L=3\ M=3\rangle = 1 \cdot |2\,2\rangle |1\,1\rangle$

$L_- |L=3\ M=3\rangle = \sqrt{(3+3)(3-3+1)} \cdot$

$\cdot |L=3\ M=2\rangle = l_-^{(1)} |2\,2\rangle |1\,1\rangle +$

$+ l_-^{(2)} |2\,2\rangle |1\,-1\rangle = \sqrt{(2+2)(2-2+1)}\, |2\,1\rangle |1\,1\rangle +$

$+ \sqrt{(1+1)(1-1+1)}\, |2\,2\rangle |1\,0\rangle$

$|L=3\ M=2\rangle = \sqrt{\frac{4}{6}} |2\,1\rangle |1\,1\rangle +$

$+ \sqrt{\frac{2}{6}} |2\,2\rangle |1\,0\rangle$

$L_- |L=3\ M=2\rangle = \sqrt{(3+2)(3-2+1)} \cdot$

$\cdot |L=3\ M=1\rangle = (l_-^{(1)} + l_-^{(2)}) \cdot$

$\cdot \sqrt{\frac{2}{3}} |2\,1\rangle |1\,1\rangle + (l_-^{(1)} + l_-^{(2)}) \cdot$

$\cdot \sqrt{\frac{1}{3}} |2\,2\rangle |1\,0\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \sqrt{6} |2\,0\rangle |1\,1\rangle +$

$+ \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \sqrt{2} |2\,1\rangle |1\,0\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} \cdot \sqrt{4} |2\,1\rangle |1\,0\rangle$

$+ \sqrt{\frac{1}{3}} \sqrt{2} |2\,2\rangle |1\,-1\rangle$

$L = 3$ 7 вект. ф-ций

$|2\,{-2}\rangle |1\,{-1}\rangle = |L=3\rangle |M=-3\rangle$

$|L=3\ M=-2\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} |2\,{-1}\rangle |1\,{-1}\rangle +$

$+ \sqrt{\frac{1}{3}} |2\,{-2}\rangle |1\,0\rangle$

$|L=2\ M=2\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} |2\,1\rangle |1\,1\rangle +$

$+ \sqrt{\frac{1}{3}} |2\,2\rangle |1\,0\rangle$

Совершаем другую лин. комбин. этих векторов

$L_+ (\alpha |2\,1\rangle |1\,1\rangle + \beta |2\,2\rangle |1\,0\rangle) = 0$

$(l_+^{(1)} + l_+^{(2)}) |2\,1\rangle |1\,1\rangle \alpha +$

$+ (l_+^{(1)} + l_+^{(2)}) |2\,2\rangle |1\,0\rangle \beta = 0$

$\sqrt{4} |2\,2\rangle |1\,1\rangle \alpha + \sqrt{2} |2\,2\rangle |1\,1\rangle \beta = 0$

$\sqrt{4} \cdot \alpha + \sqrt{2} \beta = 0 \quad \Rightarrow \alpha = \frac{1}{\sqrt{3}} \quad \beta = -\frac{2}{\sqrt{3}}$

$|L=2\ M=2\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} |2\,1\rangle |1\,1\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} |2\,2\rangle |1\,0\rangle$

$L_+ |\ell\ell\rangle = 0$

$L_- |L=2, M=2\rangle = \sqrt{4}\,|L=2\ M=1\rangle =$

$= \ldots |2\,0\rangle|1\,1\rangle + \ldots |2\,1\rangle|1\,0\rangle +$

$+ \ldots |2\,2\rangle|1\,-1\rangle$

$L=3$ — 7 векторов

$L=2$ — 5 векторов

всего $(2\ell_1+1)(2\ell_2+1) = 15$

$|L=1\ M=1\rangle = \alpha|2\,0\rangle|1\,1\rangle + \beta|2\,1\rangle|1\,0\rangle +$

$+ \gamma|2\,2\rangle|1\,-1\rangle$

$L_+ |L=1\ M=1\rangle = 0 = (\ell_+^{(1)} + \ell_+^{(2)})|2\,1\rangle|1\,1\rangle\alpha +$

$+ (\ell_+^{(1)} + \ell_+^{(2)})|2\,1\rangle|1\,0\rangle\beta + \gamma(\ell_+^{(1)} + \ell_+^{(2)})|2\,2\rangle|1\,1\rangle$

$= \alpha\sqrt{6}\,|2\,1\rangle|1\,1\rangle + \beta\sqrt{4}\,|2\,2\rangle|1\,0\rangle +$

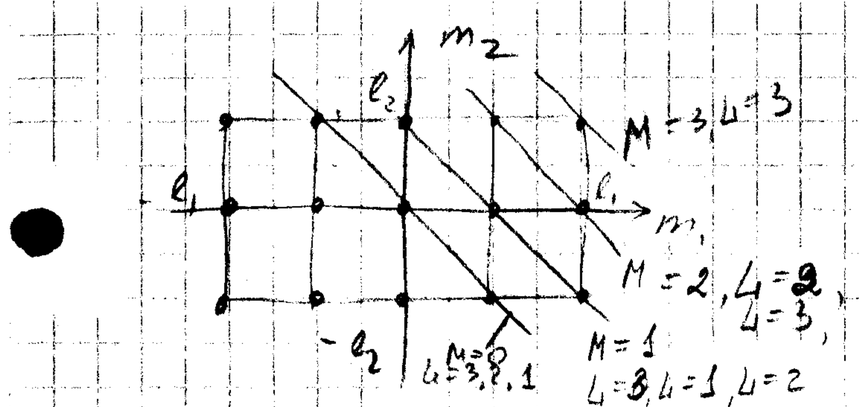
$+ \beta\sqrt{2}\,|2\,1\rangle|1\,1\rangle + \gamma\sqrt{2}\,|2\,2\rangle|1\,0\rangle$

$$\begin{cases} \alpha\sqrt{6} + \beta\sqrt{2} = 0 \\ \beta\sqrt{4} + \gamma\sqrt{2} = 0 \end{cases} \qquad \alpha = \sqrt{\frac{1}{10}} \quad \beta = -\sqrt{\frac{3}{10}} \quad \gamma = \sqrt{\frac{6}{10}}$$

способ проверки

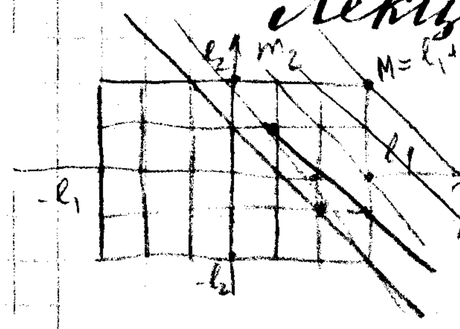
$\langle L=3\ M=2 \mid L=2\ M=2\rangle = 0$

$\langle L=3\ M=1 \mid L=2\ M=1\rangle = 0$



лекция 18

28.04.04



$$(2\ell_1+1)(2\ell_2+1) = \sum_{L=\ell_1-\ell_2}^{L=\ell_1+\ell_2}(2L+1)$$

$|L\,M\rangle$:

$$|L\,L\rangle = \sum_{m_1+m_2=L} a_{m_1 m_2}\,|\ell_1 m_1\rangle|\ell_2 m_2\rangle$$

$L_+ |L\,L\rangle = 0$

$= \ell_+^{(1)} + \ell_+^{(2)}$

Действуя $|L\,L\rangle$, мы действуем на него соотв. кол-во раз

2 метод нахожд. коэф-ов Клебша Гордона

$$|L\,M\rangle = \sum_{m_1+m_2=M} a_{m_1 m_2} \cdot |\ell_1 m_1\rangle|\ell_2 m_2\rangle$$

2 усл.:

$L^2\,|L\,M\rangle = L(L+1)\,|L\,M\rangle$

Сложение орбитального момента со спином. шаровые спиноры

$l_1 = l \qquad l_2 = 1/2$

$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$

полный момент

$|lm\rangle = Y_{lm}(\theta, \varphi)$

$|l_2 = \frac{1}{2} \quad m_2 = +\frac{1}{2}\rangle = |\uparrow\rangle$

$|l_2 = \frac{1}{2} \quad m_2 = -\frac{1}{2}\rangle = |\downarrow\rangle$

$S_+|\uparrow\rangle = 0 \qquad S_+|\downarrow\rangle = \sqrt{\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}+1\right)}\,|\uparrow\rangle$

$S_-|\downarrow\rangle = 0 \qquad S_-|\uparrow\rangle = 1\cdot|\downarrow\rangle$

$j_{max} = l + 1/2$

$j_{min} = l_1 - 1/2$

$|j, \underset{j_z}{m_j}\rangle = |lm\rangle|\uparrow\rangle \cdot \alpha +$

$m_j = m + \frac{1}{2}$

$+ |l\, m+1\rangle|\downarrow\rangle \cdot \beta$

$m_j = m+1-1/2$

m не имеет физ. смысла, физ. смысл имеет m_j

$j^2|j m_j\rangle = j(j+1)|j m_j\rangle =$

$= \left(l+\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{3}{2}\right)|j m_j\rangle = \left(l^2+2l+\frac{3}{4}\right)|j m_j\rangle$

с др. стор.

$j^2|j m_j\rangle = (\vec{l}+\vec{s})^2|j m_j\rangle =$

$= (\underbrace{\bar{l}^2}_{l(l+1)} + 2\bar{l}\bar{s} + \underbrace{\bar{s}^2}_{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)})|j m_j\rangle$

$= \left(l^2 + l + \frac{3}{4} + 2\bar{l}\bar{s}\right)|j m_j\rangle$

$l|j m_j\rangle = 2\bar{l}\bar{s}|j m_j\rangle =$

$= (2l_z s_z + l_+ s_- + l_- s_+)|j m_j\rangle$

$l\alpha|lm\rangle|\uparrow\rangle + l\beta|l\, m+1\rangle|\downarrow\rangle =$

$= \alpha\cdot 2m\cdot\left(\frac{1}{2}\right)\cdot|lm\rangle|\uparrow\rangle + \beta\cdot 2(m+1)\cdot$

$\cdot\left(-\frac{1}{2}\right)|l\, m+1\rangle|\downarrow\rangle + \alpha\cdot\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\cdot$

$\cdot|l\, m+1\rangle|\downarrow\rangle + \underset{\text{т.к. } S_-|\downarrow\rangle=0}{0} + \underset{\text{т.к. } S_+|\uparrow\rangle=0}{0} +$

$+ \beta\cdot\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\,|lm\rangle|\uparrow\rangle$

коэф-ты при $|lm\rangle|\uparrow\rangle$:

$(l-m)\cdot\alpha = \sqrt{(l-m)(l+m+1)}\cdot\beta$

при $|l\, m+1\rangle|\downarrow\rangle$:

$(l+m+1)\beta = \sqrt{(l-m)(l+m+1)}\cdot\alpha$

любое другое j, кроме $l \pm \frac{1}{2}$ привело бы к несовместной системе ур-ий

$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ – нормировка

$\Rightarrow \alpha = \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}} \qquad \beta = \sqrt{\frac{l-m}{2l+1}}$

$$|j\, m_j\rangle = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l+m+1}\; Y_{lm}(\theta,\varphi) \\ \sqrt{l-m}\; Y_{lm-1}(\theta,\varphi) \end{pmatrix} =$$

$$= \underbrace{\Omega^{+}_{j\, m_j}}_{\text{шаровой спинор}} \qquad j = l + \frac{1}{2}$$

$$|j = l - \tfrac{1}{2} \quad m_j = m + \tfrac{1}{2}\rangle \equiv \Omega^{-}_{j\, m_j} =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l-m}\; Y_{lm} \\ -\sqrt{l+m+1}\; Y_{lm+1} \end{pmatrix}$$

$$|LM\rangle = \sum_{m_1+m_2=M} C^{L l_1 l_2}_{M m_1 m_2} |l_1 m_1\rangle |l_2 m_2\rangle$$

$$\langle L'M' | LM\rangle = \delta_{LL'}\, \delta_{MM'}$$

матрица обратных преобраз:

$$|l_1 m_1\rangle |l_2 m_2\rangle = \sum_L C^{L l_1 l_2}_{M m_1 m_2} \cdot |L\; M = m_1 + m_2\rangle$$

Движение в центрально-симметричном поле

Радиальное уравнение Шредингера

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r)$$

набор наблюдаемых: $H, l^2, l_z \to n_r, l, m$

l_x и l_y не входят в полный набор наблюд., они генерируют вырождение

$$H|\psi_{n_r l m}\rangle = E_{n_r l m} |\psi_{n_r l m}\rangle$$

возьмем другую волн. ф-ию с той же энергией

$$[l_+; H] = 0$$

$$|\chi\rangle = l_+ |\psi_{n_r l m}\rangle = |\psi_{n_r l m+1}\rangle$$

$$H|\chi\rangle = H l_+ |\psi_{n_r l m}\rangle = l_+ H |\psi_{n_r l m}\rangle =$$

$$= E_{n_r l m}\, l_+ |\psi_{n_r l m}\rangle = |\chi\rangle \cdot E_{n_r l m}$$

т.е. мы получили друг. сост. с той же энергией

те интегралы движ., к-ые не вошли в набор, эн. не изм., но новые состояния порождают

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V(r)\right)\psi = 0$$

$$\psi = Y_{lm}(\theta,\varphi) \cdot R_{n_r l}(r)$$

$$R_{n_r l}(r) = \frac{u(r)}{r}$$

$$u'' + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V(r) - \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}}_{\text{кинетич. эн. движ. по углам, назыв. центробеж. потенциалом}}\right) u = 0$$

$u(0) = 0$ — гранич. условие

объяснение:

1) неправильное:
если $u(0) \neq 0$, то $R = \frac{u(0)}{r} \sim \frac{c}{r}$,
и не вып. усл. нормировки,

$$1 = \int d\vec{r}\, |\psi|^2 = \int d\Omega\, r^2 dr\, |Y_{lm}|^2 \cdot |R|^2 =$$

$$= \int_0^{+\infty} |u(r)|^2 dr = 1$$ — вполне возможно!

2) неправильное:

$$R(r \to 0) \sim \frac{c}{r} \to \infty$$

а волн. ф-ия по своей природе не должна обращ. в ∞
Но это неправильно! $\exists$ потенциалы,
где $u(r)\big|_{r\to 0} \sim r^{2/3}$, тогда $R(r\to 0) \sim r^{-1/3} \to \infty$

3) примем за правильное

$u(0) = 0$ для того, чтобы кинет. энергия $\langle \frac{p^2}{2m} \rangle$ была конечна

$$\frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta = -\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta_{\theta\varphi}}{r^2} =$$

$$= \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)}_{\text{кин. эн. движ. по радиусу}} + \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l^2}{r^2}}_{\text{центробеж. пот-л}}$$

будем работать с 1 слагаемым

$$\int d\Omega\, r^2 dr \cdot R^*(r) \cdot \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} \cdot r^2 \frac{\partial}{\partial r} R(r)\, |Y_{lm}|^2 =$$

$$= \int_0 dr \cdot r^2 \cdot \frac{c}{r} \cdot \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \cdot r^2 \frac{\partial}{\partial r}\frac{c}{r} =$$

$$= \int_0 dr \cdot r^2 \cdot \frac{c^2}{r^3} \sim \int_0 \frac{1}{r}\, dr = \infty$$

лекция 19

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

$$u(0) = 0$$

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \langle \psi | \frac{\hat{p}^2}{2m} | \psi \rangle = \frac{1}{2m}\langle \psi | \hat{p}\,\hat{p} | \psi \rangle$$

$$\frac{\hbar}{i}\nabla\psi(x) = \frac{\hbar}{i}\left(\vec{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \vec{e}_\varphi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\psi$$

$$\int d\vec{x}\left[\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial r}\psi^*\right)\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial r}\psi\right) + \left(-\frac{\hbar}{i}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\psi^*\right)\cdot\left(\frac{\hbar}{i}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\psi\right) + \left(\frac{\hbar}{i}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi^*\right)\cdot\left(\frac{\hbar}{i}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi\right)\right]$$

Оставим только 1 слаг. – кин. эн. движ по радиусу

$$\int d\Omega\, r^2 dr\, |Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2 \cdot \hbar^2 \cdot \frac{\partial}{\partial r}R^*\frac{\partial}{\partial r}R = \int_0^\infty r^2 dr\, R^{*\prime}R' \cdot \hbar^2$$

если

$$u(0) = c \neq 0 \qquad R(r)\big|_{r=0} = \frac{c}{r}$$

$$\int_0 r^2 dr\left(-\frac{c^*}{r^2}\right)\left(-\frac{c}{r^2}\right) = \int_0 dr\,\frac{|c|^2}{r^2} = \infty$$

Задача. Вариационный для кинетической энергии

Из вариац. принципа ясно, что чем больше l, тем выше E

$\Rightarrow$ если потенциал убывает на ∞, то $\exists$ конеч. число уровней

есть оценка на кол-во уровней с данным l в дискр. спектре:

$$N_l \le \frac{1}{2l+1}\,\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty r\,dr\cdot\tilde V(r)$$

$$\tilde V(r) = \begin{cases} 0 & V(r) > 0 \\ |V(r)| & V(r) < 0 \end{cases}$$

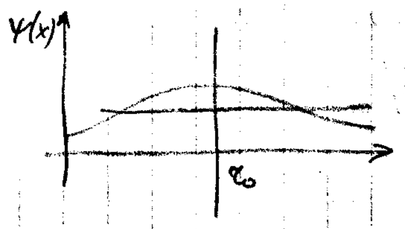
а) $V(r\to\infty) = -A r^s$

$$\int_0^\infty r\,dr\cdot r^s = \infty \qquad s \ge -2$$

$s < 0$?

Вариац. принцип гласит, что min H явл. решением стац. ~~реш~~ Ур. Шр.

Построим пробную волн. ф-ию



$$\underbrace{\frac{p_0^2}{2m}}_{\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r_0^2}} \cdot \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{l(l+1)}{r^2}}_{\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r_0^2}}\ \underbrace{V(r)}_{-Ar_0^s} =$$

$s > -2$

устремляя $r_0\to\infty$ получим отриц. сред. знач. эн., но $E \xrightarrow[r_0\to\infty]{} 0$

$$E_{n,l} \sim -\frac{1}{(n_r+l+1)^2}$$

б) $V(r\to 0) = -A r^s$

$$\int_0 r\,dr\,A r^s = \infty$$

$s \le -2$ все ф-лы аналогичны

$$\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{l(l+1)}{r_0^2}\,(-Ar_0^s) \qquad r_0\to 0,\ E\to -\infty$$

наблюдается не сгущение уровней, а проваливание в $-\infty$

не см. Ланд.-Лиф.

Падение на центр

$$V(r) = -\frac{A}{r^2}$$

$$u'' + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{A}{r^2}\right)u = 0$$

$$u(r) = \sqrt{r}\,W(r)$$

$$R(r) = \frac{W(r)}{\sqrt{r}}$$

$$W'' + \frac{1}{r}W' + \Big(\overbrace{\frac{2m}{\hbar^2}E}^{k^2} - \underbrace{\Big(\frac{(l+\frac12)^2}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2}A\cdot\frac{1}{r^2}\Big)}_{-\frac{\nu^2}{r^2}}\Big)W = 0$$

$$W(r) = A\,J_\nu(kr) + B\,N_\nu(kr)$$

$$A\,J_\nu(kr) + B\,J_{-\nu}(kr)$$

$$\nu = \sqrt{\left(l+\frac12\right)^2 - \frac{2m}{\hbar^2}A} = i\xi$$

$$J_\nu(z\to 0) \sim z^\nu$$

$$R \sim \frac{1}{\sqrt{r}}\cdot r^{\pm\nu} = r^{-\frac12 \pm i\xi}$$

$\sim \frac{1}{\sqrt{r}} \exp(\pm i\xi \ln r)$ — бесконеч. осцилляции

$\ln r \to -\infty$ при $r \to 0$

$$\int_S \vec{j}\, d\vec{S} \equiv 0$$

в качестве пов-ти выберем сферу радиуса r_0, тогда

$$\int_{сф} \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^* \right) d\vec{S} =$$

$$= \int_{сф} \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial r} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial r} \psi^* \right)\Big|_{r=r_0} \cdot r_0^2\, d\Omega =$$

$$= \int \frac{\hbar}{2mi} \left(R^* \frac{\partial}{\partial r} R - R \frac{\partial}{\partial r} R^* \right) \cdot r_0^2 \, |Y_{lm}|^2 d\Omega =$$

$$= \frac{\hbar}{2mi} r_0^2 \left(R^* \frac{\partial}{\partial r} R - R \frac{\partial}{\partial r} R^* \right)\Big|_{r=r_0}$$

возьмем какое-нибудь из решений

$$R = C \cdot r^{-\frac{1}{2} + i\xi}$$

$$\int \vec{j}\, d\vec{S} = \frac{\hbar}{2mi} r_0^2 |C|^2 \Big(r^{-\frac{1}{2} - i\xi} \cdot \left(-\frac{1}{2} + i\xi\right) \cdot$$

$$\cdot r^{-\frac{3}{2} + i\xi} - r^{-\frac{1}{2} + i\xi} \left(-\frac{1}{2} - i\xi\right) \cdot r^{-\frac{3}{2} - i\xi} \Big)\Big|_{r=r_0} =$$

$$= \frac{\hbar}{2mi} \cdot |C|^2 \cdot 2i\xi = \frac{\hbar\xi}{m} |C|^2$$

если взять $R = C \cdot r^{-\frac{1}{2} - i\xi}$

$$\int \vec{j}\, dS = -\frac{\hbar\xi}{m} |C|^2$$

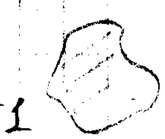
из сингулярности $-\frac{A}{r^2}$ может истекать поток частиц

$\Rightarrow$ потенциал $-\frac{A}{r^2}$ может служить непр. источником ч-ц.

аналогично он служит и поглотителем частиц

Если $V^* \neq V$, то возможно рожд. (или поглощ.) ч-ц аналогично ведет себя и $-\frac{A}{r^2}$

берем 3х мерный волновой пакет, нормир. на 1



$p = 1$ $\quad \bullet - \frac{A}{r^2}$

напускаем пакет на потенциал

существует поток, направл. в сторону центра

$\downarrow p$

$p < 1$

есть ситуации, когда ничего не вылетает — падение на центр, т.е. поглощение ч-ц потенциалом

Движение частицы со спином в центр поле

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix} = \psi_1(x)\,|\uparrow\rangle + \psi_2(x)\,|\downarrow\rangle$$

$$H = \underbrace{\frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r)}_{l^2} + \underbrace{\bar{l}\bar{S} \cdot W(r)}_{j^2}$$

$$|\psi\rangle \equiv R^{\pm}(r)\, \Omega^{\pm}_{jm_j}$$

$$\bar{l}\bar{S} = \left[\underbrace{(l+S)^2}_{j} - l^2 - S^2 \right] \cdot \frac{1}{2}$$

$$\bar{l}\bar{S}\, \Omega^{+}_{jm_j} = \frac{1}{2}\left(j(j+1) - l(l+1) - S(S+1) \right) \Omega^{+}_{jm_j} = \overbrace{\frac{1}{2}\left(\left(l+\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{3}{2}\right) - l^2 - l - \frac{3}{4} \right)}^{= l/2} \Omega^{+}_{jm_j}$$

$R^{+} = \frac{U(r)}{r}$

$$\bar{l}\bar{S}\, \Omega^{-}_{jm_j} = -\frac{l-1}{2} \Omega^{-}_{jm_j}$$

5.05.04

Лекция 20

Движение частицы в магнитном поле

$$\hat{H} = \frac{\left(\hat{p} - \frac{e}{c}\hat{A}\right)^2}{2m} + e\varphi = \frac{\hat{p}^2}{2m} \underbrace{- \frac{e}{mc}\hat{p}\hat{A}(\hat{x})}_{(*)} +$$

$$+ \frac{e^2}{2mc^2}\hat{A}^2(\hat{x}) + e\varphi(\hat{x})$$

Если есть э/с потенциал то третьим слагаемым можно пренебречь

$$(*) - \frac{e}{2mc}\left[\hat{p}\hat{A}(\hat{x}) + \hat{A}(\hat{x})\hat{p}\right] =$$

$$= \left[\hat{p}\hat{A} - \hat{A}\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla A(x) - \hat{A}(x)\frac{\hbar}{i}\nabla = \right.$$

$$\left. = \frac{\hbar}{i}\operatorname{div}\hat{A}(\hat{x}) = 0 \text{ по калибровке}\right] =$$

$$= -\frac{e}{2mc}\left(\hat{p}\hat{A} + \hat{A}\hat{p}\right) = -\frac{e}{mc}\hat{p}\hat{A}$$

Возьмем частицу со спином

$$\hat{H} = \frac{\left(\hat{p} - \frac{e}{c}\hat{A}\right)^2}{2m} + e\varphi - 2\mu_0 \underbrace{\vec{S}\vec{H}}_{\text{взаимодействие спина с полем}}$$

$$\mu_0 = \frac{e\hbar}{2mc}$$

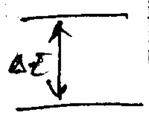
задача решается по отдельности для спина и для движ. ч-цы в маг. поле

$$\vec{H} = (0; 0; H_z)$$

$$-2\mu_0 S_z H_z |\uparrow\rangle = \underbrace{-\mu_0 H_z}_{\text{добавка к эн.}} |\uparrow\rangle$$

$$-2\mu_0 S_z H_z |\downarrow\rangle = \mu_0 H_z |\downarrow\rangle$$

$\Rightarrow$ расщепление уровней



$$\Delta E = 2\mu_0 H_z = 2\frac{e\hbar}{2mc}H_z = \hbar\cdot\frac{eH_z}{mc} = \hbar\omega_0$$

ω_0 - ларморовская частота

$$\vec{A} = (0; x\cdot H_z; 0)$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\left(\hat{p}_y - \frac{e}{c}x\cdot H_z\right)^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m}$$

$\psi = \chi(x)\cdot e^{ik_y y}\cdot e^{ik_z z}$ - ищем реш. в таком виде

$\hat{H}\psi = E\psi$ - стац. ур. шр.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\chi'' + \frac{\left(\hbar k_y - \frac{e}{c}H_z\cdot x\right)^2}{2m}\cdot\chi + \frac{\hbar^2}{2m}k_z^2\chi = E\chi$$

замена $x \to \frac{\hbar k_y c}{eH_z} + x$

$$\chi'' + \frac{2m}{\hbar^2}\left(\underbrace{E - \frac{\hbar^2}{2m}k_z^2}_{\varepsilon} - \frac{k}{2}\cdot x^2\right)\chi = 0$$

$$k = \frac{e^2H_z^2}{mc^2} = m\left(\frac{eH_z}{mc}\right)^2 = m\omega_0^2$$

$\Rightarrow \omega = \sqrt{\frac{k}{m}} = \omega_0$

спектр: $\varepsilon_n = \hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right)$ $n = 0, 1, \ldots$

окон. ответ: $E_n = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right) \pm$

$\pm \mu_0 H_z$

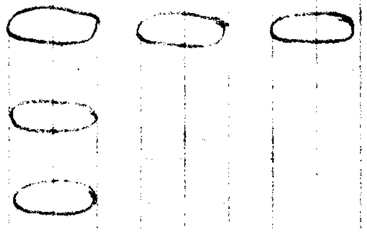
решение красивое, но бесполезно

если например $\vec{A} = (-yH_z; 0; 0)$

спектр - такой же, но

волн. ф-ия - другая $\chi(x)e^{ik_x\cdot x}e^{ik_z z}$

с равными успехами точка может двигаться по след. траект.



т.е. - наши волн. ф-ии - суперпозиция таких состояний.

выберем

$$\vec{A} = \left(-\frac{y}{2}H_z ; \frac{x}{2}H_z ; 0\right)$$

(в симметричном задан так и надо выбирать)

$$-\frac{e}{mc}\vec{p}\vec{A} = -\frac{e}{mc}\frac{H_z}{2}\underbrace{(xp_y - yp_x)}_{\hbar l_z} = -\frac{e\hbar}{2mc}H_z l_z =$$

$$= -\mu_0 H_z l_z$$

спин $-2\mu_0 \vec{S}\vec{H}$ орбит. мом. $-\mu_0 \vec{l}\vec{H}$

$$\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \mu_0 l_z H_z + \frac{k}{2}[x^2+y^2], \text{ где}$$

$$k = \frac{e^2}{c^2}\frac{1}{m}\frac{H_z^2}{4}$$, т.к. мы подействовали на A_x и A_y

$$k = m\left(\frac{\omega_0}{2}\right)^2 \qquad \omega = \frac{\omega_0}{2}$$

$$l_z = \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$\psi(\vec{r}) = \psi(\rho, y, z) = R(\rho)\cdot e^{i\tilde{m}\varphi}\cdot e^{ik_z z}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(R'' + \frac{1}{\rho}R' - \frac{\tilde{m}^2}{\rho^2}R\right) + \frac{\hbar^2}{2m}k_z^2 \cdot R - \mu_0 \tilde{m} H_z$$

$$+ \frac{k}{2}\rho^2 \cdot R = E\cdot R$$

Обозначим: $E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \equiv \mathcal{E}$

$\mu_0 H_z = \frac{\hbar\omega_0}{2}$, получаем:

$$R'' + \frac{1}{\rho}R' + \left(\frac{2m}{\hbar^2}\left(\mathcal{E} + \frac{\hbar\omega_0}{2}\tilde{m}\right) - \frac{\tilde{m}^2}{\rho^2} - \frac{2m}{\hbar^2}\frac{k}{2}\rho^2\right)R = 0$$

Определим $\rho_0^2 = \frac{\hbar}{\sqrt{km}}$, тогда

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\rho_0^2} = \frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{k}{m}} = \frac{\hbar\omega_0}{4}$$

$$\frac{2m}{\hbar^2}\cdot\frac{k}{2} = \frac{1}{\rho_0^4}$$

$R(\rho) \equiv e^{-\rho^2/2\rho_0^2} H(\rho)$, подставляем:

$$f'' + f'\left(\frac{1}{\rho} - \frac{2\rho}{\rho_0^2}\right) + f\left(\frac{2m}{\hbar^2}\left(\mathcal{E} + \frac{\hbar\omega_0}{2}\tilde{m}\right) - \frac{\tilde{m}^2}{\rho^2} - \cancel{\frac{1}{\rho_0^4}\rho^2} + \cancel{\frac{\rho^2}{\rho_0^4}} - \frac{1}{\rho_0^2} - \frac{1}{\rho_0^2}\right) = 0$$

$$f'' + f'\left(\frac{1}{\rho} - \frac{2\rho}{\rho_0^2}\right) + f\left(\frac{2m}{\hbar^2}\left(\mathcal{E} + \frac{\hbar\omega_0}{2}(\tilde{m}-1)\right) - \frac{\tilde{m}^2}{\rho^2}\right) = 0$$

Ищем решение в виде:

$$f(\rho) = \sum_n c_n \rho^n$$

$$\rho^{n-2}: a_n n(n-1) + c_1 \cdot n - c_{n-2}(n-2)\frac{2}{\rho_0^2} + a\cdot c_{n-2} - \tilde{m}^2 c_n = 0$$

$$c_n(n^2 - \tilde{m}^2) = \left((n-2)\frac{1}{\rho_0^2} - a\right)c_{n-2}$$

$$c_{n_1-2} = 0 \quad \Rightarrow \quad n_1 = |\tilde{m}_1|$$

$$c_{n_2+2} = 0 \quad \Rightarrow \quad a = \frac{2n_2}{\rho_0^2}$$

$n_2 = n_1 + 2k = |\hat{m}| + 2k$

$\frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{\hbar\omega_0}{2}(\hat{m} - 1)\right) = \frac{2n_2}{\rho_0^2} = \frac{2}{\rho_0^2}(|\hat{m}| + 2k)$

Окончательно получаем:

$E = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} - \frac{\hbar\omega_0}{2}\hat{m} + \frac{\hbar\omega_0}{2} +$

$+ \frac{\hbar\omega_0}{2}|\hat{m}| + \hbar\omega_0 k$

Частица может крутиться в 2х напр.!

$\hat{m} > 0$

$E = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \hbar\omega_0\left(k + \frac{1}{2}\right)$

$\hat{m} < 0$

$E = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \hbar\omega_0\left(k + \frac{1}{2} + |\hat{m}|\right)$

Если $k = 0$, то можно написать явный вид ВФ:

$\psi = e^{ik_z z} \cdot e^{i\hat{m}\varphi} \cdot e^{-\rho^2/2\rho_0^2} \cdot |\hat{m}|$

$\hat{m} > 0 \qquad E = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \frac{\hbar\omega_0}{2}\sqrt{}$

$\hat{m} < 0 \qquad E = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \hbar\omega_0\left(|\hat{m}| + \frac{1}{2}\right)$

Заметим, что $k = m\left(\frac{\omega_0}{2}\right)^2$

(гарм. осц ρ в магн. поле)

Лекция 21

20.09.04

Стационарная теория возмущений

$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$

Пусть $H = H_0 + H_I$ ← гамильтониан возмущения

↑ невозмущ. гамильтониан

$H_0|\psi_m^{(0)}\rangle = E_m^{(0)}|\psi_m^{(0)}\rangle$

Для H_0 мы знаем все $E_m^{(0)}$ и $|\psi_m^{(0)}\rangle$

$|\psi_m^{(0)}\rangle$ – базис, т.е. полная ортонормир. система

„$H_I \ll H_0$"

↙ поправка в t порядке

$|\psi_m\rangle = |\psi_m^{(0)}\rangle + |\psi_m^{(1)}\rangle + |\psi_m^{(2)}\rangle + \ldots$

$E_m = E_m^{(0)} + E_m^{(1)} + E_m^{(2)} + \ldots$

Вопрос о сходимости этих рядов бесконечный, для большинства систем 1 порядок – это достаточно хорошее приближение, но оба ряда расходятся.

Например, пусть $f(x) = 10^6 + 10^4 x + \frac{1}{1-x} =$

$= 10^6 + 10^4 x + 1 + x + x^2 + x^3 + \ldots$

$f(2) = 10^6 + 2\cdot 10^4 - 1$

$f^{(0)} = 10^6 + 1$

$f^{(1)} = 10^4 \cdot 2 + 2$) хорошее приближение

$f^{(2)} = 4$ $\quad f^{(3)} = 8$

каждая след. поправка удаляет нас от прав. ответа.

Т.е. для расходящегося ряда
∃ место, где надо остановиться,
это будет наилучшее приближение
к истинному ответу
обычно берут 2 порядка

обычно $H = H_0 + H_I + H_{II}$
$E_I^{(3)} \ll E_{II}^{(1)}$

Условия применимости:

1) $\| |\psi_n^{(1)}\rangle \| \ll \| |\psi_n^{(0)}\rangle \|$

2) $E_n^{(1)} \ll E_n^{(0)}$

1 Порядок СТВ для невырожд. уровня

$H = H_0 + H_I$

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

$E_m = E_m^{(0)} + E_m^{(1)} + \dots$

$H_0|\psi_m^{(0)}\rangle + H_I|\psi_m^{(0)}\rangle + H_0|\psi_m^{(1)}\rangle +$
$+ \underbrace{H_I|\psi_m^{(1)}\rangle}_{\to 0} + \dots = E_m^{(0)}|\psi_m^{(0)}\rangle +$
$+ E_m^{(1)}|\psi_m^{(0)}\rangle + E_m^{(0)}|\psi_m^{(1)}\rangle + \underbrace{E_m^{(1)}|\psi_m^{(1)}\rangle}_{\text{пренебр. (2 порядок малости)}}$

$(H_I - E_m^{(1)})|\psi_m^{(0)}\rangle = (E_m^{(0)} - H_0)|\psi_m^{(1)}\rangle$

приравниваем коэф-ты разложения по базису

берем базис $|\psi_n^{(0)}\rangle$

$\langle\psi_n^{(0)}|H_I|\psi_m^{(0)}\rangle - E_n^{(1)}\delta_{nm} =$
$= E_m^{(0)}\langle\psi_n^{(0)}|\psi_m^{(1)}\rangle -$
$- \underbrace{\langle\psi_n^{(0)}|H_0}_{\langle\psi_n^{(0)}|E_n^{(0)}}|\psi_m^{(1)}\rangle = (E_m^{(0)} - E_n^{(0)})\langle\psi_n^{(0)}|\psi_m^{(1)}\rangle$

1) $m \neq n$

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

отсюда опред. $|\psi_m^{(1)}\rangle$

2) $m = n$

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

$\Rightarrow E_m^{(1)} = \boxed{\langle\psi_m^{(0)}|H_I|\psi_m^{(0)}\rangle}$

$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\psi_n = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle$

в данном случае: $(m \neq n)$

$|\psi_m^{(1)}\rangle = \sum_n |\psi_n^{(0)}\rangle\langle\psi_n^{(0)}|\psi_m^{(1)}\rangle$

не известен коэф-т $C_{\text{н}} = \langle\psi_n^{(0)}|\psi_m^{(1)}\rangle$

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

тогда $E_m^{(1)} = \langle\psi_m^{(0)}|H_I|\psi_m^{(0)}\rangle$

для доопределения используем условие нормировки

$$\langle \psi_m | \psi_m \rangle = 1$$

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

$$\langle \psi_m | \psi_m \rangle = \langle \psi_m^{(0)} | \psi_m^{(0)} \rangle +$$

$$+ \langle \psi_m^{(0)} | \psi_m^{(1)} \rangle + \langle \psi_m^{(1)} | \psi_m^{(0)} \rangle + \underbrace{\langle \psi_m^{(1)} | \psi_m^{(1)} \rangle}_{\text{2 порядок малости}} =$$

$$= 1 + \left[C + \sum_m 0 \right] + C^* = 1$$

$$\Rightarrow C + C^* = 0 \Rightarrow C^* = -C \Rightarrow C = i\alpha,$$

вещ. число

$$|\psi_m\rangle = |\psi_m^{(0)}\rangle + |\psi_m^{(1)}\rangle =$$

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

$i\alpha$ — очень маленький фазовый сдвиг, не наблюдается

выбираем $\alpha = 0$

$$|\psi_m\rangle = |\psi_m^{(0)}\rangle + \sum_{n \neq m} \dots$$

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

условие применимости:

$$\left| \langle \psi_n^{(0)} | H_I | \psi_m^{(1)} \rangle \right| \ll \left| E_m^{(0)} - E_n^{(0)} \right|$$

но ∃ системы с близкими уровнями, к ним СТВ неприменима

$$\left| \langle \psi_m^{(0)} | H_I | \psi_{m\pm1}^{(0)} \rangle \right| \ll \left| E_m^{(0)} - E_{m\pm1}^{(0)} \right|$$

также должно выполняться ограничение: пусть

$$H_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

тогда $|\psi_1^{(0)}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ $E_1 = 1$

$$|\psi_2^{(0)}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad E_2^{(0)} = 2$$

$$H_I = \begin{pmatrix} 10 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$E_1 = 1 + \langle \psi_1^{(0)} | H_I | \psi_1^{(0)} \rangle = 11 \text{ - неправ. ответ}$$

$$H_0 + H_I = \begin{pmatrix} 11 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

но загвоздка в том, что 10 - нельзя считать малой поправкой к разности 2 - 1

1.0.

Определим ф-ию Грина

$$\hat{G}_0(E) = \frac{1}{E - H_0} = (E - H_0)^{-1} =$$

$$= \sum_n \frac{|\psi_n^{(0)} \times \psi_n^{(0)}|}{E - E_n^{(0)}}$$

$$\hat{G}_0'(E) = \sum_{n \neq m} \frac{|\psi_n^{(0)}\rangle \langle \psi_n^{(0)}|}{E - E_n^{(0)}}$$; заметим, что

$$|\psi_m^{(1)}\rangle = G_0'(E_m^{(0)}) H_I |\psi_m^{(0)}\rangle$$

возьмем $H_0 = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$, тогда

$$G_0(E) = \left(E + \frac{\hbar^2}{2m}\Delta\right)^{-1}$$

$$\left(E + \frac{\hbar^2}{2m}\Delta\right) \hat{G}_0(E) = 1 \quad \Big| \cdot \langle \bar{x} |, \cdot |\bar{x}'\rangle$$

$\bar{x}$ — базисные векторы

$$\langle \bar{x} | \hat{G}_0(E) | \bar{x}' \rangle = G_0(\bar{x}; \bar{x}')$$

$$\left(E + \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\bar{x}}\right) G_0(\bar{x},\bar{x}') = \delta(\bar{x}-\bar{x}')$$

$\Rightarrow G_0$ - ф-ция Грина для ур-ия Гельмгольца, а это - расходящ. сферич. волна

$$G_0(\bar{x},\bar{x}') \sim \frac{e^{ik|\bar{x}-\bar{x}'|}}{|\bar{x}-\bar{x}'|}$$

---

2 порядок СТВ (невырожд. уровень)

$$H = H_0 + H_I$$

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

$$E_m = E_m^{(0)} + E_m^{(1)} + E_m^{(2)}$$, подст. в УШ, учит. только 2 порядок

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

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

$$+ E_m^{(2)}|\psi_m^{(0)}\rangle$$

$$H_I|\psi_m^{(1)}\rangle - E_m^{(1)}|\psi_m^{(1)}\rangle - E_m^{(2)}|\psi_m^{(0)}\rangle =$$

$$= (E_m^{(0)} - H_0)|\psi_m^{(2)}\rangle \quad \Big| \cdot \langle\psi_n^{(0)}|$$

1) $n \neq m$

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

$$= (E_m^{(0)} - E_n^{(0)})\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(2)}\rangle$$

$$|\psi_m^{(2)}\rangle = \sum_{n\neq m}|\psi_n^{(0)}\rangle\langle\psi_n^{(0)}|\psi_m^{(2)}\rangle$$

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

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

2) $n = m$

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

получим:

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

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

$$E_m^{(2)} = \sum_{k\neq m}\frac{\langle\psi_m^{(0)}|H_I|\psi_k^{(0)}\rangle\cdot\langle\psi_k^{(0)}|H_I|\psi_m^{(0)}\rangle}{E_m^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

лекция 22

9.09.04

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

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

условие применимости

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

$E_m^{(1)} \ll |E_m^{(0)} - E_{m\pm1}^{(0)}|$ - не обязат., но придающее физ. смысл

$$|\psi_m^{(2)}\rangle = \sum_{n\neq m}|\psi_n^{(0)}\rangle\langle\psi_n^{(0)}|\psi_m^{(1)}\rangle$$ - самост.

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

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

$$= \sum_{n \neq m} \frac{|\langle \psi_n^{(0)} | H_I | \psi_n^{(0)} \rangle|^2}{\underbrace{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}_{<0 \text{ для осн. состояния}}}$$ – веществ., <0 для осн. состояния

Теперь рассм. вырожденные уровни энергии.

$E_m^{(0)}$, волн. ф-ии обозначим

$$|\psi_{ma}^{(0)}\rangle$$

a – номер ф-ии для энергии $E_m^{(0)}$

$a = 1, 2, \dots, A$

A – кратность $E_m^{(0)}$

$$|\chi^{(0)}\rangle = \sum_{a=1}^{A} C_a |\psi_{ma}^{(0)}\rangle$$

$$\sum_{a=1}^{A} |C_a|^2 = 1$$

$$H_0 |\chi^{(0)}\rangle = E_m^{(0)} |\chi^{(0)}\rangle$$

ряд ТВ для ВУ надо начинать с $\chi^{(0)}$ с неизвестными C_a

$$H = H_0 + H_I$$

$$E_m = E_m^{(0)} + E_m^{(1)} + \dots$$

$$|\psi_m\rangle = |\chi^{(0)}\rangle + |\psi_m^{(1)}\rangle + \dots$$

1й порядок:

$$H_0 |\psi_m^{(1)}\rangle + H_I |\chi^{(0)}\rangle =$$

$$= E_m^{(0)} |\psi_m^{(1)}\rangle + E_m^{(1)} |\chi^{(0)}\rangle$$

$$(*) \quad H_I |\chi^{(0)}\rangle - E_m^{(1)} |\chi^{(0)}\rangle =$$

$$= E_m^{(0)} |\psi_m^{(1)}\rangle - H_0 |\psi_m^{(1)}\rangle$$

нужно учесть 1) $\langle \psi_{ma}^{(0)} | \psi_{mb}^{(0)} \rangle = \delta_{ab}$

2) $\langle \psi_n^{(0)} | \chi^{(0)} \rangle = \sum_{a=1}^{A} C_a \langle \psi_n^{(0)} | \psi_{ma}^{(0)} \rangle = 0$ при $m \neq n$

умножим $(*)$ на $\langle \psi_n^{(0)} |$

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

$\langle \psi_{mb}^{(0)} | \cdot (*)$

$$\langle \psi_{mb}^{(0)} | H_I | \chi^{(0)} \rangle - E_m^{(1)} \langle \psi_{mb}^{(0)} | \chi^{(0)} \rangle = 0$$

это верно $\forall b = 1, 2, \dots, A$

отсюда можно найти C_a

$$\langle \psi_{mb}^{(0)} | \chi^{(0)} \rangle = \sum_{a=1}^{A} C_a \underbrace{\langle \psi_{mb}^{(0)} | \psi_{ma}^{(0)} \rangle}_{\delta_{ab}} =$$

$$= C_b$$

$$\sum_{a=1}^{A} \langle \psi_{mb}^{(0)} | H_I | \psi_{ma}^{(0)} \rangle C_a - E_m^{(1)} C_b = 0$$

это секулярное ур-ие

матричный элемент

$$\langle \psi_{mb}^{(0)} | H_I | \psi_{ma}^{(0)} \rangle = H_{ba}$$

т.к. H – ЭО, то $H_{ba} = H_{ab}^*$

вычислив эти матричные элементы, нужно найти соб. в-ра и соб. значения матрицы, т.е. такие c_a, что:

$$\sum_{a=1}^{A} H_{ba} c_a = E_m^{(1)} c_b$$

$$\sum_{a=1}^{A} |c_a|^2 = 1$$

Но у матрицы A соб. значений, какой брать? Все

$E_{m,1}^{(1)}$ $\quad |\chi_1^{(0)}\rangle = \sum_{a=1}^{A} c_a^{(1)} |\psi_{ma}^{(0)}\rangle$

1 из СВ

$E_{m,2}^{(1)}$ $\quad |\chi_2^{(0)}\rangle = \sum_{a=1}^{A} c_a^{(2)} |\psi_{ma}^{(0)}\rangle$

$\vdots$

$E_{m,A}^{(1)}$ $\quad |\chi_A^{(0)}\rangle = \sum_{a=1}^{A} c_a^{(A)} |\psi_{ma}^{(0)}\rangle$

Многослойная теория возмущений

$H_0 + H_I + H_{II}$ $\quad$ Сначала применить ТВ для H_I, затем считать то, что получилось, точным, а потом применить ТВ для H_{II}

$H_0 \gg H_I \gg H_{II}$

Если расщепление от $H_I \gg$, чем от H_{II}, то ТВ можно применять.

Теория возмущений для близких уровней

1
2
3

$$H_0 |\psi_k^{(0)}\rangle = E_k^{(0)} |\psi_k^{(0)}\rangle$$

$k = 1, 2, 3$

близкие $\Leftrightarrow$ $|\langle \psi_i^{(0)} | H_I | \psi_k^{(0)} \rangle| \gtrsim |E_i^{(0)} - E_k^{(0)}|$

Будем считать, что это трехкратно вырожденный 1 уровень

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & & 0 \\ & E_2 & \\ 0 & & E_3 \end{pmatrix} =$$

$$= \underbrace{\begin{pmatrix} E_1 & & 0 \\ & E_1 & \\ 0 & & E_1 \end{pmatrix}}_{\tilde{H}_0} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & & 0 \\ & E_2 - E_1 & \\ 0 & & E_3 - E_1 \end{pmatrix}}_{\Delta H}$$

$$H = H_0 + H_I = \tilde{H}_0 + [\Delta H + H_I]$$

возмущение $\tilde{H}_I$

Но если уровни идут $\equiv$,

то этот рецепт ~~непри~~ неприменим

Уравнение Дирака.

$$i\hbar \frac{d}{dt}\psi = H_D \psi$$

можно писать $\partial/\partial t$

у ψ 4 компоненты

для нахождения спектра $E\psi = H_D\psi$

$$\psi = \begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}U\\ V\end{pmatrix}$$

U, V – столбцы 2х комплексных чисел (биспиноров)

$$H_D = \vec{\alpha} c\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right) + e\varphi + \beta mc^2$$

c – скорость света

φ – э/с потенциал

$\vec{A}$ – вектор-потенциал

$\vec{p}$ – импульс $= \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$

$$\beta = \left(\begin{array}{cc|cc} 1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ \hline 0 & 0 & & \\ 0 & 0 & -1 & 0\\ & & 0 & -1\end{array}\right) = \begin{pmatrix}\hat{1} & \hat{0}\\ \hat{0} & -\hat{1}\end{pmatrix}$$ будем писать $\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$

$$\alpha_1 = \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & 0 & 1\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ \hline 0 & 1 & 0 & 0\\ 1 & 0 & 0 & 0\end{array}\right) = \begin{pmatrix}0 & \sigma_1\\ \sigma_1 & 0\end{pmatrix}$$

$$\alpha_2 = \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & 0 & -i\\ 0 & 0 & i & 0\\ \hline 0 & -i & 0 & 0\\ i & 0 & 0 & 0\end{array}\right) = \begin{pmatrix}0 & \sigma_2\\ \sigma_2 & 0\end{pmatrix}$$

$$\alpha_3 = \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & -1\\ \hline 1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0 & 0\end{array}\right) = \begin{pmatrix}0 & \sigma_3\\ \sigma_3 & 0\end{pmatrix}$$

УД опис. ч-цу со спином 1/2 в эл. и магн. полях

Свободные частицы Дирака

$\varphi = 0$ $\qquad E\psi = H_D\psi$

$\vec{A} = 0$

в УШ $\quad H = \frac{p^2}{2m}$ $\qquad \frac{e^{\frac{i}{\hbar}\bar{p}\bar{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$ – решение непр. спектр

Лекция 23

14.09.04

$$\int d\bar{x}\ \psi_p^*(x)\cdot\psi_p(x)=\delta(\vec{p}-\vec{p}')$$

$$\psi_q(\bar{x})=\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\bar{q}\bar{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\cdot\begin{pmatrix}u_q\\ v_q\end{pmatrix}$$

$$\hat{p}\,\psi_q(\bar{x})=\frac{\hbar}{i}\bar{\nabla}\psi_q(\bar{x})=\bar{q}\,\psi_q(\bar{x})$$

$$\int d\bar{x}\ \psi_{\bar{q}'}^*(\bar{x})\cdot\psi(x)=\delta(\bar{q}-\bar{q}')$$

$$u_q^+u_q+v_q^+v_q=1$$

$$E_{\bar{q}}\begin{pmatrix}u_q\\ v_q\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}mc^2 & \vec{\sigma}\vec{p}c\\ \vec{\sigma}\vec{p}c & -mc^2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}u_q\\ v_q\end{pmatrix}\cdot$$

$$\cdot\frac{e^{i/\hbar\,\vec{q}\vec{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$$

$$\varphi=0,\quad \vec{A}=0$$

$$H_D=c\vec{\alpha}\vec{p}+\vec{\beta}mc^2=\begin{pmatrix}mc^2 & c\vec{\sigma}\vec{p}\\ c\vec{\sigma}\vec{p} & -mc^2\end{pmatrix}$$

$$\frac{\hbar}{i}\nabla$$

$$\psi_{\bar{q}}(\bar{x})=\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\bar{q}\bar{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\begin{pmatrix}u_{\bar{q}}\\ v_{\bar{q}}\end{pmatrix}$$

$$\int d\bar{x}\ \psi_{\bar{q}'}^+(\bar{x})\,\psi_{\bar{q}}(\bar{x})=\delta(\bar{q}-\bar{q}')$$

$$u_q^+u_q+v_q^+v_q=1$$

$$H_D\,\psi_{\bar{q}}(\bar{x})=E_{\bar{q}}\,\psi_{\bar{q}}(\bar{x})$$

$$\begin{pmatrix}mc^2 & \bar{q}\bar{\sigma}c\\ \bar{q}\bar{\sigma}c & -mc^2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}u\\ v\end{pmatrix}=E\begin{pmatrix}u\\ v\end{pmatrix}$$

$$\begin{cases}mc^2u+c\bar{\sigma}\bar{q}v=Eu\\ \bar{q}\bar{\sigma}cu-mc^2v=Ev\end{cases}$$

$$v=\frac{\bar{q}\bar{\sigma}c}{E+mc^2}u$$

подставим v в 1 ур-ие

$$mc^2u+\frac{1}{E+mc^2}c^2(\bar{q}\bar{\sigma})^2u=Eu$$

$$\bar{q}^2c^2u=(E-mc^2)(E+mc^2)u$$

т.о. u – $\forall$ столбец 2х чисел, для к-го энергия равна:

$$E^2-m^2c^4=q^2c^2\qquad E=\pm\omega_q$$

где $\omega_q \equiv \sqrt{\bar{q}^2c^2+m^2c^4}$

Условие нормировки $\begin{pmatrix}u\\v\end{pmatrix}$:

$$u^+u + v^+v = 1 = u^+u + u^+ \frac{c\bar{q}\bar{\sigma}}{E+mc^2}\cdot\frac{c\bar{\sigma}\bar{q}}{E+mc^2}u = 1$$

$$u^+u\left(1+\frac{c^2\bar{q}^2}{(E+mc^2)^2}\right)=1$$

$$u^+u\left(\frac{E^2+2Emc^2+m^2c^4+\bar{q}^2c^2}{(E+mc^2)^2}\right)=1$$

$$u^+u\,\frac{2E}{E+mc^2}=1$$

Будем выбирать u в соотв с $\min \vec{q}$

$$\bar{q} = |\bar{q}|\bar{n} = |q|\{\sin\theta\cos\varphi;\ \sin\theta\sin\varphi,\ \cos\theta\}$$

$$u_1 = \begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{pmatrix}\sqrt{\frac{E+mc^2}{2E}}$$

$$u_2 = \begin{pmatrix}-\sin\frac{\theta}{2}\\ \cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{pmatrix}\sqrt{\frac{E+mc^2}{2E}}$$

$\bar{\sigma}\bar{n}\,u_1 = +1\cdot u_1$

$\bar{\sigma}\bar{n}\,u_2 = -1\cdot u_2$, тогда

$$v_1 = \frac{c\bar{\sigma}\bar{q}}{E+mc^2}u_1 = \frac{c|q|}{E+mc^2}\begin{pmatrix}\cos\theta/2\\ \sin\theta/2\,e^{i\varphi}\end{pmatrix}\sqrt{\frac{E+mc^2}{2E}} =$$

$$= \left[|q|c = \sqrt{q^2c^2} = \sqrt{(E-mc^2)(E+mc^2)}\right] =$$

$$= \sqrt{\frac{E-mc^2}{2E}}\begin{pmatrix}-\sin\theta/2\\ \cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{pmatrix}$$

$E = +\omega_q \qquad E = -\omega_q$

Т.о. найдены 4 ВФ - р-ия ур. Дирака

Пронумеруем решения:

$$\psi_1 = \begin{pmatrix}u_1\\v_1\end{pmatrix}\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\bar{q}\bar{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}};\quad E = +\omega_q$$

$$\psi_2 = \begin{pmatrix}u_2\\v_2\end{pmatrix}\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\bar{q}\bar{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}};\quad E = +\omega_q$$

$$\psi_3 = \begin{pmatrix}u_1\\v_1\end{pmatrix}\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\bar{q}\bar{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}};\quad E = -\omega_q$$

$$\psi_4 = -\begin{pmatrix}u_2\\v_2\end{pmatrix}\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\bar{q}\bar{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}};\quad E = -\omega_q$$

$\theta = 0,\ \varphi = 0$ $\qquad q\to 0 \Rightarrow \omega_q \to mc^2$

$$u_1 = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\sqrt{\frac{E+mc^2}{2E}}$$

$$v_1 = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\sqrt{\frac{E-mc^2}{2E}}$$

$$u_2 = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\sqrt{\frac{E-mc^2}{2E}}$$

$$v_2 = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\sqrt{\quad}$$

$$\psi_1 = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix} \qquad \psi_2 = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix}$$

$E = \omega_q = mc^2$

$$\psi_3 = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix} \qquad \psi_4 = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix}$$

$E = -\omega_q = -mc^2$

Трансформационные свойства ур-ия Дирака

$x' = x\cos\varphi - y\sin\varphi = [\delta\varphi - \text{мало}] = x - y\delta\varphi$

$y' = y + x\delta\varphi$

$\chi(\bar{x}) \to \chi(x - y\delta\varphi; y + x\delta\varphi; z) =$

$= \chi(x,y,z) + \left(x\frac{d}{dy}\delta\varphi - y\frac{d}{dx}\delta\varphi\right)\chi(x,y,z) =$

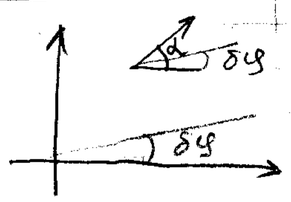
$= \left(1 + i\delta\varphi \underbrace{\frac{xp_y - yp_x}{\hbar}}_{l_z} + \dots\right)\chi = \underbrace{e^{i\delta\varphi l_z}}_{\text{унит. оператор к-ый поворач. ВФ и оп-ры}}\chi$

$e^{i\varphi l_z} p_x e^{-i\varphi l_z} = p_x\cos\varphi - p_y\sin\varphi$

$e^{i\varphi l_z}\left(\frac{p^2}{2m}\right)e^{-i\varphi l_z} = \frac{p^2}{2m}$

т.о. l_z будем искать такой, чтобы он оставлял H_D постоянным.

$\bar{E}(\bar{x})$



$\bar{E}(\bar{x}) \to (1 + i\delta\varphi l_z + i\delta\varphi \hat{S}_z)\bar{E}(\bar{x}) =$

$= e^{i\delta\varphi\underbrace{(l_z + S_z)}_{\Sigma}}\bar{E}(\bar{x})$

При поворотах унит. матрица повор. выглядит след. образом:

$e^{i\varphi l_z + i\varphi\Sigma_z}\psi(x)$

l_z ост. прежним, Σ_z – матрица 4×4

Найдем вид Σ_z:

$j_z = l_z + \Sigma_z$

$\bar{j} = \bar{l} + \bar{\Sigma}$

$e^{i\varphi j}(\bar{\alpha}\bar{p}c + \beta mc^2)e^{-i\varphi j_z} \equiv \bar{\alpha}\bar{p}c + \beta mc^2$

$e^{i\varphi j_z} = e^{i\varphi(l_z + \Sigma_z)} = e^{i\varphi l_z}e^{i\varphi\Sigma_z}$

$e^{i\varphi\Sigma_z}\cancel{e^{i\varphi l_z}}(\beta mc^2)\cancel{e^{-i\varphi l_z}}e^{-i\varphi\Sigma_z} = \beta mc^2$

$e^{i\varphi\Sigma_z}\beta e^{-i\varphi\Sigma_z} = \beta$ или $[\Sigma_z;\beta] = 0$

$e^{i\varphi j_z}\bar{\alpha}\bar{p}c\, e^{-i\varphi j_z} = \bar{\alpha}\bar{p}c$

$e^{i\varphi\Sigma_z}\bar{\alpha}e^{-i\varphi\Sigma_z}e^{i\varphi l_z}\bar{p}e^{-i\varphi l_z}c = \bar{\alpha}\bar{p}c$

$e^{i\varphi\Sigma_z}\alpha_1 e^{-i\varphi\Sigma_z} = \alpha_1\cos\varphi - \alpha_2\sin\varphi$

$e^{i\varphi\Sigma_z}\alpha_2 e^{-i\varphi\Sigma_z} = \alpha_2\cos\varphi - \alpha_1\sin\varphi$

$e^{i\varphi\Sigma_z}\alpha_3 e^{-i\varphi\Sigma_z} = \alpha_3$

$\bar{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \bar{\sigma} \\ \bar{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$

$e^{i\varphi\frac{1}{2}\sigma_3}\sigma_1 e^{-i\varphi\frac{\sigma_3}{2}} = \sigma_1\cos\varphi - \sigma_2\sin\varphi$

$e^{i\varphi\frac{1}{2}\sigma_3}\sigma_2 e^{-i\varphi\frac{1}{2}\sigma_3} = \sigma_2\cos\varphi + \sigma_1\sin\varphi$

$e^{i\varphi\frac{1}{2}\sigma_3}\sigma_3 e^{-i\varphi\frac{1}{2}\sigma_3} = \sigma_3$

т.о. $e^{i\varphi\Sigma_z} = \begin{pmatrix} e^{i\varphi\frac{1}{2}\sigma_3} & 0 \\ 0 & e^{i\varphi\frac{1}{2}\sigma_3} \end{pmatrix}$

Замечание:

$\begin{pmatrix} \hat{A} & \hat{B} \\ \hat{C} & \hat{D} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \hat{A}' & \hat{B}' \\ \hat{C}' & \hat{D}' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{A}\hat{A}' + \hat{B}\hat{C}' & \hat{A}\hat{B}' + \hat{B}\hat{D}' \\ \hat{C}\hat{A}' + \hat{D}\hat{C}' & \hat{C}\hat{B}' + \hat{D}\hat{D}' \end{pmatrix}$

$\Sigma_z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix}$ $\quad \Sigma_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 \\ 0 & \sigma_1 \end{pmatrix}$

$$\Sigma_y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \sigma_2 & 0 \\ 0 & \sigma_2 \end{pmatrix} \qquad \bar{\Sigma} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \bar{\sigma} & 0 \\ 0 & \bar{\sigma} \end{pmatrix}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi = c\frac{\hbar}{i}\bar{\nabla}\bar{\alpha}\psi - e\bar{\alpha}\bar{A}\psi + e\varphi\psi + \beta mc^2\psi$$

$$\left(+i\hbar\beta c\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} + i\hbar\beta\bar{\alpha}\bar{\nabla}\cdot c + e\beta\bar{\alpha}\bar{A} - e\beta\varphi - \beta^2 mc^2\right)\psi = 0$$

$$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}; \bar{\nabla}\right)$$

$$A_\mu = (\varphi; -\bar{A}) \quad ; \quad \gamma_\mu = (\beta; \beta\bar{\alpha})$$

$$\left(i\hbar c\,\partial_\mu \gamma^\mu - eA_\mu\gamma^\mu - mc^2\right)\psi = 0$$

16.09.04

Лекция 24

$$\left(i\hbar c\frac{\partial}{\partial x^\mu}\gamma^\mu - eA_\mu\gamma^\mu - mc^2\right)\psi = 0$$

$A_\mu = (\varphi; -\bar{A})$ $\qquad V^\mu = (\rho^2, \vec{\ell})$

$$V(x) \to e^{i\varphi j_z}\psi(x) = e^{i\varphi\Sigma_z}e^{i\varphi\ell_z}\psi(x) =$$

$$= e^{i\varphi\Sigma_z}\psi(x')$$

$$e^{i\varphi j_z}(\bar{\alpha}\bar{p}c)e^{-i\varphi j_z} = \bar{\alpha}\bar{p}c$$

$e^{i\varphi\ell_z}$ — $e^{i\varphi\Sigma_z}$

$$\psi(x) \to M\psi(x')$$

Если $\exists M$: $M\gamma^\mu M^{-1} =$ преобр. лор (γ^μ)

Тогда выполнение ур — ур ψ при преобр. 1.

$\gamma^\mu\partial_\mu \to inv$; $\gamma^\mu A_\mu \to inv$

---

1. 0. Симметрия в кв. мех!

$H^+ = H$

$$W^0 \to W^0\frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}} + W^1\frac{v/c}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$$

$$W^1 \to \underbrace{W^1\frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}}}_{ch\xi} + \underbrace{W^0\frac{v/c}{\sqrt{1-v^2/c^2}}}_{sh\xi}$$

$th\xi = \frac{v}{c} \Rightarrow \xi$ $\exists$ всегда

Короче: $M\gamma^0M^{-1} = \gamma^0 ch\xi + \gamma^1 sh\xi$ $\quad \gamma^0 = \beta\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$

$M\gamma^1M^{-1} = \gamma^1 ch\xi + \gamma^0 sh\xi$ $\quad \gamma^1 = \beta\alpha_1 = \begin{pmatrix}0&\sigma_1\\-\sigma_1&0\end{pmatrix}$

Матрица M имеет вид:

$$M = e^{-\frac{1}{2}\xi\alpha_1} = \begin{pmatrix} ch\frac{\xi}{2} & -\sigma_1 sh\frac{\xi}{2} \\ -\sigma_1 sh\frac{\xi}{2} & ch\frac{\xi}{2}\end{pmatrix}$$ — эрм. матр

$$M\gamma^0M^{-1} = \begin{pmatrix} ch\frac{\xi}{2} & -\sigma_1 sh\frac{\xi}{2} \\ -\sigma_1 sh\frac{\xi}{2} & ch\frac{\xi}{2}\end{pmatrix}\gamma^0\begin{pmatrix} ch\frac{\xi}{2} & \sigma_1 sh\frac{\xi}{2} \\ \sigma_1 sh\frac{\xi}{2} & ch\frac{\xi}{2}\end{pmatrix} =$$

$$= \left(-u-\right)\begin{pmatrix} ch\frac{\xi}{2} & \sigma_1 sh\frac{\xi}{2} \\ -\sigma_1 sh\frac{\xi}{2} & -ch\frac{\xi}{2}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ch^2\frac{\xi}{2}+sh^2\frac{\xi}{2} & 2\sigma_1 sh\frac{\xi}{2}ch\frac{\xi}{2} \\ -2\sigma_1 ch\frac{\xi}{2}sh\frac{\xi}{2} & -ch^2\frac{\xi}{2}-sh^2\frac{\xi}{2}\end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} ch\xi & \sigma_1 sh\xi \\ -\sigma_1 sh\xi & -ch\xi\end{pmatrix} = \gamma^0 ch\xi + \gamma^1 sh\xi$$

Спин и спиральность. Четырехкомпонентные уравнения свободных частиц УД.

$$\bar{\Sigma} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}\bar{\sigma} & 0\\ 0 & \bar{\sigma}\end{pmatrix}$$ — спин

$\bar{\Sigma}$ — инт-л движ., если

$$\left[\bar{\Sigma}; \bar{\alpha}\bar{p}c + \beta mc^2\right] = a \quad , \quad a = 0$$

но $a \neq 0 \Rightarrow \bar{\Sigma}$ не сохр-ся

$$\bar{\Sigma}\bar{p} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}\bar{\sigma}\bar{p} & 0\\ 0 & \bar{\sigma}\bar{p}\end{pmatrix}$$ — инт-л движ.

$$\bar{\alpha}\bar{p}c = c\begin{pmatrix}0 & \bar{\sigma}\bar{p}\\ \bar{\sigma}\bar{p} & 0\end{pmatrix}$$

Введем величину, наз. спиральностью:

$\lambda = \frac{\bar{\Sigma}\bar{p}}{\sqrt{\bar{p}^2}}$ - инт. движения

$[\lambda; H_D] = 0$

$\bar{q}\,\bar{\sigma}\,u_1 \equiv |\bar{q}|\,u_1$

$\bar{q}\,\bar{\sigma}\,u_2 \equiv -|\bar{q}|\,u_2$

$\left.\begin{array}{l}\psi_1, \lambda = \frac{1}{2}; E = +\omega_q \dfrac{e^{i\bar{q}\bar{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \\ \psi_2, \bar{p} = \bar{q}, \lambda = -\frac{1}{2}; E = +\omega_q\end{array}\right\}$ - рел. эл-н со спином $1/2$, массой m, эн. ω_q

$\left.\begin{array}{l}\psi_3, \bar{p} = \bar{q}; \lambda = \frac{1}{2}; E = -\omega_q \\ \psi_4; \bar{p} = \bar{q}; \lambda = -\frac{1}{2}; E = -\omega_q\end{array}\right\}$

Ур-ие непрерывности. Закон сохр. вероятности

$\rho = |\psi(x)|^2$

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

$\frac{d}{dt}\rho + \mathrm{div}\vec{j} = 0$

$\frac{d}{dt}\int_V dx \cdot \rho = -\int_S \vec{j}\, ds$

$i\hbar \frac{d}{dt}\psi = \hat{\alpha} c \frac{\hbar}{i}\bar{\nabla}\psi(\beta mc^2 + e\varphi - e\hat{\alpha}\bar{A})\psi$

$-i\hbar \frac{d}{dt}\psi^+ = -\frac{\hbar}{i}\bar{\nabla}_c \psi^+ \hat{\alpha}^+ + \psi^+(\beta^* mc^2 + e\varphi - e\bar{A}\hat{\alpha}^*)$

$\psi^+ \cdot i\hbar \frac{d}{dt}\psi = \psi^+ \hat{\alpha} c \frac{\hbar}{i}\bar{\nabla}\psi + \psi^+(\beta mc^2 + e\varphi - e\hat{\alpha}\bar{A})\psi$

$-i\hbar\left(\frac{d}{dt}\psi^+\right)\psi = -\frac{\hbar}{i}(\nabla\psi^+)\hat{\alpha} c\psi + \psi^+(\beta mc^2 + e\varphi - e\bar{A}\hat{\alpha})\psi$

$i\hbar \frac{d}{dt}\psi^+\psi = \frac{\hbar}{i}\bar{\nabla}_c(\psi^+\hat{\alpha}\psi)$

обозначим:

$\rho = \psi^+\psi$

$\bar{j} = \psi^+ \hat{\alpha} c \psi$

$\frac{d}{dt}\rho + \mathrm{div}\bar{j} = 0$

$E > 0 \Rightarrow \rho \to +\rho$

$E < 0 \Rightarrow \rho \to -\rho$

$\left.\begin{array}{l}\rho = e\psi^+\psi \\ \bar{j} = e\psi^+\hat{\alpha} c\psi\end{array}\right\}$

Скорость частицы Дирака

$\bar{v} = \dot{\bar{x}} = \frac{i}{\hbar}[H_D; \bar{x}] = \frac{i}{\hbar}[\hat{\alpha}\bar{p}c + \beta mc^2; \hat{\bar{x}}] =$

$= \left[[p_i; x_j] = -i\hbar\delta_{ij}\right] = \hat{\alpha} c = \vec{\hat{x}}$

$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \qquad \bar{p} = \frac{m\bar{v}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \qquad \bar{v} \sim \frac{\bar{p}c^2}{E}$

$|\psi> = \psi(x) = \int d\bar{q}\,(c_1(\bar{q})\psi_1(\bar{x}) + c_2(\bar{q})\psi_2(\bar{x}))$

$\int d\bar{q}\,[|c_1(\bar{q})|^2 + |c_2(\bar{q})|^2 = 1$

$\int dq\, c_1(q) \cdot \frac{e^{-i\bar{q}\bar{x}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} * \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{cq + mc^2}{2cq}} \cdot \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix} \\ \sqrt{\frac{cq - mc^2}{2cq}} \cdot \begin{pmatrix} \cos\theta/2 \\ \sin\frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix} \end{pmatrix}$

Лекция 25

21.09.04

Замечание:

$$\int dq \cdot f(\bar{q})\, e^{\frac{i}{\hbar}\bar{q}\bar{x}}\, \Phi(\bar{q}) = f(\bar{p}) \cdot \int dq\, e^{\frac{i}{\hbar}\bar{q}\bar{x}}\, \Phi(\bar{q})$$

$$\int d\bar{q}\; c_1(\bar{q})\, \underbrace{\psi_{1,\bar{q}}(\bar{x})}_{= \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{\omega_q + mc^2}{2\omega_q}}\, u_1 \\ \sqrt{\frac{\omega_q - mc^2}{2\omega_q}}\, u_1 \end{pmatrix}} \ominus$$

$$\sqrt{\frac{\omega_q - mc^2}{2\omega_q}} = \frac{\bar{\sigma}\bar{q}c}{\sqrt{2\omega_q(\omega_q + mc^2)}}\, u_1$$

$$u_1 = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2}\, e^{i\varphi} \end{pmatrix} \qquad \vec{\sigma}\vec{q}\, u_1 = |\bar{q}| \cdot u_1$$

$$\ominus \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{\omega_p + mc^2}{2\omega_p}}\, \chi_1(x) \\ \frac{\vec{\sigma}\vec{p}c}{\sqrt{2\omega_p(\omega_p + mc^2)}}\, \chi_1(x) \end{pmatrix},$$

где $\chi_1(x) = \int d\bar{q}\, \frac{e^{\frac{i}{\hbar}\bar{q}\bar{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2}\, e^{i\varphi} \end{pmatrix} \cdot c_1(\bar{q})$

это состояние ч-цы со спином 1/2 и импульсом $\bar{q}$ (спин „смотрит" на направление импульса)

Замечание: $\omega_p = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}$

$$\psi_2 = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{\omega_q + mc^2}{2\omega_q}}\, u_2 \\ \underbrace{-\sqrt{\frac{\omega_q - mc^2}{2\omega_q}}\, u_2}_{\frac{\bar{\sigma}\bar{q}c}{\sqrt{2\omega_q(\omega_q + mc^2)}}} \end{pmatrix} \cdot \frac{e^{\frac{i}{\hbar}\bar{q}\bar{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$$

$$\int dq\, c_2(\bar q)\,\psi_2(x) = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{\omega_p+mc^2}{2\omega_p}} & \chi_2(x) \\ \sqrt{\frac{\bar\sigma\,\bar p}{2\omega_p(\omega_p+mc^2)}} & \chi_2(x) \end{pmatrix}$$

$$\chi_2(x) = \int dq\, \frac{e^{\frac{i}{\hbar}\bar q\bar x}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \begin{pmatrix} -\sin\frac{\theta}{2} \\ \cos\frac{\theta}{2}\, e^{i\varphi} \end{pmatrix} c_2(\bar q)$$

$$\omega_p = \sqrt{\hat p^2 c^2 + m^2 c^4}$$

$$|\psi\rangle = \int dq \left(c_1(q)\psi_1 + c_2(q)\psi_2\right) =$$

$$= \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{\omega_p+mc^2}{2\omega_p}} & \chi(\bar x) \\ \frac{\bar\sigma\bar p c}{\sqrt{2\omega_p(\omega_q+mc^2)}} & \chi(\bar x) \end{pmatrix}$$

$$\int d\bar q \left(|c_1(q)|^2 + |c_2(q)|^2\right) = 1$$

$$\chi(x) = \int d\bar q \cdot \frac{e^{\frac{i}{\hbar}\bar q\bar x}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \left(\begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2}\, e^{i\varphi} \end{pmatrix} c_1(\bar q) + \right.$$

$$\left. + \begin{pmatrix} -\sin\frac{\theta}{2} \\ \cos\frac{\theta}{2}\, e^{i\varphi} \end{pmatrix} c_2(\bar q) \right)$$

Условие нормир.: $\int dx\, \chi^*(x)\chi(x) = 1$

$\bar v = \dot{\bar x} = \hat{\alpha} c \qquad \bar v = \frac{\bar p c^2}{E_p} = \frac{\bar p c^2}{\omega_p}$

Работаем с сост. $E > 0$:

$$\langle \xi | \hat{\alpha} c | \psi \rangle = \langle \eta | \frac{\bar p c^2}{\omega_p} | \chi \rangle$$

$$\left(\eta^+ \left(\sqrt{\frac{\omega_p+mc^2}{2\omega_p}} \right)^+ , \eta^+ \frac{\bar\sigma\bar p c}{\sqrt{2\omega_p(\omega_p+mc^2)}} \right) c \begin{pmatrix} 0 & \bar\sigma \\ \bar\sigma & 0 \end{pmatrix}$$

можно не писать, т.к. оператор эрмитов

$$\cdot \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{\omega_p+mc^2}{2\omega_p}} & \chi \\ \frac{\bar\sigma\bar p c}{\sqrt{2\omega_p(\omega_p+mc^2)}} & \chi \end{pmatrix} = \eta^+ \left[\sqrt{\frac{\omega_p+mc^2}{2\omega_p}} \cdot \right.$$

$$\left. \cdot \frac{1}{\sqrt{2\omega_p(\omega_p+mc^2)}} \underbrace{\left(\vec\sigma(\vec\sigma\vec p) + (\vec\sigma\vec p)\vec\sigma \right)}_{2p_i} c^2 \chi \right] \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \eta^+ \left(\frac{\bar p c^2}{\omega_p}\right)\chi = \langle \eta | \frac{\bar p c^2}{\omega_p} | \chi \rangle = \langle \xi | \hat{\alpha} c | \psi \rangle$$

Квазирелятивистское приближение ур. Дирака

Тонкая структура атома водорода

$$\langle \xi | \hat{\alpha}\bar p c + \beta mc^2 | \psi \rangle = \langle \eta | \omega_p | \chi \rangle$$

↑ оп-р энергии для сост. с полож. энергией

$|q| \ll mc$, $e\Delta\varphi \ll mc^2$

$e|\overset{\uparrow}{\Delta} A| \ll mc^2$

разница в 2х точках области

только при этих условиях можно говорить о состояниях с положит. энергией у электронов. В противном случае есть примесь позитронов.

Утв.

$$\omega_p \neq mc^2 + \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2} + \dots$$

Прав. запись: $\langle \xi | \omega_p | \psi \rangle = \langle \eta | mc^2 +$

$$+ \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2} + \dots | \chi \rangle$$

Пример $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ ← перемен.

$f(A) = \frac{1}{1-A} \neq 1 + A + A^2 + \dots$

$f(A)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = (1 + A + A^2 + \dots)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

на таких ремонтных состояниях разложение писать можно

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{\omega_p + mc^2}{2\omega_p}}\,\chi \\ \frac{\bar{\sigma}\bar{p}c}{\sqrt{2\omega_p(\omega_p + mc^2)}}\,\chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(1 - \frac{p^2}{8m^2c^2}\right)\chi \\ \frac{\bar{\sigma}\bar{p}c}{2mc^2}\,\chi \end{pmatrix}$$

$$\langle\xi|-e\hat{A}|\psi\rangle = \left(\eta^+\left(1 - \frac{p^2}{8m^2c^2}\right), \eta^+\frac{\bar{\sigma}\bar{p}c}{2mc^2}\right) \cdot (-e) \cdot \begin{pmatrix} 0 & \bar{A}\bar{\sigma} \\ \bar{A}\bar{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \left(1 - \frac{p^2}{8m^2c^2}\right)\chi \\ \frac{\bar{\sigma}\bar{p}c}{2mc^2}\chi \end{pmatrix} =$$

$$= \eta^+\left[(-e)\frac{c}{2mc^2}\left[\left(1 - \frac{p^2}{8m^2c^2}\right)\bar{A}\bar{\sigma}\bar{\sigma}\bar{p} + \bar{\sigma}\bar{p}\,\bar{A}\bar{\sigma}\left(1 - \frac{p^2}{8m^2c^2}\right)\right]\right]\chi \quad (=)$$

Слагаемым $\sim \frac{1}{c^3}$ пренебрегаем

Вычислим выражение:

$$(\bar{A}\bar{\sigma})(\bar{p}\bar{\sigma}) + (\bar{p}\bar{\sigma})(\bar{A}\bar{\sigma}) = (\bar{A}\bar{p} + \bar{p}\bar{A}) + i\sigma\left[[\bar{A}\bar{p}] + [\bar{p}\bar{A}]\right]$$

$$\bar{p}f(\bar{x}) - f(\bar{x})\bar{p} = \frac{\hbar}{i}\left(\bar{\nabla}f(\bar{x})\right)$$

$$\bar{p}\bar{A} - \bar{A}\bar{p} = \frac{\hbar}{i}\operatorname{div}\bar{A} = 0$$

$$[\bar{A}\bar{p}] + [\bar{p}\bar{A}] = \frac{\hbar}{i}\operatorname{rot}\bar{A} = \frac{\hbar}{i}\vec{H}$$

Приходим к: $(=)\langle\eta|-e\frac{1}{2mc}(2\bar{p}\bar{A} + \hbar\bar{\sigma}\vec{H})|\chi\rangle =$

$$= \langle\eta|-\frac{e}{mc}\bar{p}\bar{A} - \underbrace{\frac{e\hbar}{2mc}}_{=\mu_0}\cdot 2\vec{S}\vec{H}|\chi\rangle$$

$$\langle\xi|-e\hat{A}|\psi\rangle = \langle\eta|-\frac{e}{mc}\bar{p}\bar{A} - 2\mu_0\vec{S}\vec{H}|\chi\rangle$$

$$\langle\xi|e\varphi(\bar{x})\psi\rangle = \langle\eta|e\left(1 - \frac{p^2}{8m^2c^2}\right)\varphi\left(1 - \frac{p^2}{8m^2c^2}\right) + \frac{\bar{\sigma}\bar{p}c}{2mc^2}e\varphi\frac{\bar{\sigma}\bar{p}c}{2mc^2}|\chi\rangle =$$

$$= \langle\eta|e\varphi - \frac{p^2}{8m^2c^2}e\varphi - e\varphi\cdot\frac{p^2}{8m^2c^2} + \frac{em}{8m^2c^2}\left[2\bar{\sigma}\bar{p}\varphi\bar{\sigma}\bar{p}\right]|\chi\rangle$$

$$2\bar{\sigma}\bar{p}\varphi\bar{\sigma}\bar{p} - p^2\varphi - \varphi p^2 = \left[\bar{\sigma}\bar{p}, \varphi\right]\bar{\sigma}\bar{p} + \varphi\bar{\sigma}\bar{p}\bar{\sigma}\bar{p} -$$

$$+ \bar{\sigma}\bar{p}\left[\varphi; \bar{\sigma}\bar{p}\right] + \bar{\sigma}\bar{p}\,\bar{\sigma}\bar{p}\varphi - p^2\varphi - \varphi p^2 =$$

$$= \frac{\hbar}{i}(\bar{\nabla}\varphi\bar{\sigma})\bar{\sigma}\bar{p} + \left(-\frac{\hbar}{i}\right)(\bar{\sigma}\bar{p})(\bar{\sigma}\bar{\nabla}\varphi) =$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left((\bar{\nabla}\varphi)\bar{p} - \bar{p}(\bar{\nabla}\varphi) + i\sigma\left[[\bar{\nabla}\varphi\times\bar{p}] - [\bar{p}\times\bar{\nabla}\varphi]\right]\right) =$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left(-\frac{\hbar}{i}\right)\underbrace{\bar{\nabla}\bar{p}}_{\Delta}\varphi + \hbar\bar{\sigma}\cdot 2[\bar{\nabla}\varphi\times\bar{p}] + \frac{\hbar}{i}i\sigma\left(-\frac{\hbar}{i}\right)\operatorname{rot}\bar{\nabla}\varphi$$

$$\langle\xi|e\varphi|\psi\rangle = \langle\eta|e\varphi + \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}e\Delta\varphi + \frac{\hbar}{8m^2c^2}\bar{\sigma}\cdot 2[\bar{\nabla}\varphi\times\bar{p}]$$

(никакого особого физ. смысла нет)

$\frac{\hbar}{mc} = \lambda_c$ – комптоновская длина волны

Лекция 26

23.09.04

$\left[\Delta\varphi = -4\pi\rho = \sum\delta(|x - x_i|)\right]$

Расшифруем последнее слагаемое

$$\sqrt{\mu_0}\,\bar{S}\left[-\bar{E}\cdot\frac{\bar{p}}{mc}\right]$$

$$\frac{\bar{p}}{mc} = \frac{\bar{v}/c}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

$$\varphi(\bar r) = \varphi(r)$$

$$\bar\nabla\varphi(r) = \frac{\bar r}{r}\varphi'(r)$$

$$\frac{\hbar}{2m^2c^2} e\cdot\bar S\cdot\frac{\varphi'}{r}[\vec r\times\vec p] = \underbrace{\frac{e\hbar}{2mc}}_{\sqrt{n_0}}\cdot\underbrace{\frac{\hbar}{mc}}_{\lambda_c}\cdot\frac{\varphi'}{r}\cdot\bar S\bar l$$

Внешнее φ-ие.

$$\langle\xi|H_D|\psi\rangle = \langle\xi|mc^2 + \Big[\frac{p^2}{2m} - \underbrace{\frac{e}{mc}\bar p\bar A}_{\text{взаимодействие заряда с магн. полем}} -$$

$$- 2\mu_0\bar S\bar H + e\varphi\Big] +$$

$$+\Big[-\frac{p^4}{8m^3c^2} - \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}e\Delta\varphi + \frac{\hbar}{2m^2c^2}e\bar S[\bar\nabla\varphi\cdot\bar p]\Big]|\psi\rangle$$

Тонкая структура спектра атома водорода

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2n^2}\ ;\quad \psi_{nem}(\bar r) = R_{ne}(r)Y_{em}(\theta,\varphi)$$

всего n^2 наборов $\begin{cases} l = 0,1,\dots,n-1 \\ -l\le m\le l \end{cases}$

$\psi_{nem}|\uparrow\rangle \qquad \psi_{nem}|\downarrow\rangle$

т.о. нужно найти $2n^2\times 2n^2$ матрицу (мы её искать не будем)

В качестве базиса волн. ф-ий $|\psi_{na}^{(0)}\rangle$

выбираем такие, чтобы искомая матрица была диагональной, а именно:

$$R_{ne}(\bar r)\,\Omega^{\pm}_{j\,m_j}\quad \begin{matrix}\swarrow j = l+\frac12 \\ \nwarrow j = l-\frac12\end{matrix}$$

— вид волн. ф. — шаровые спиноры

$$H_{na} = \langle\psi_{na}^{(0)}|H_I|\psi_{na}^{(0)}\rangle\ ;\quad E_n^{(1)} = \langle H_{es}\rangle$$

нужно вычислить: $\langle -\frac{p^4}{8m^2c^2}\rangle$,

$\langle\frac{\hbar^2}{8m^2c^2}e\Delta\varphi\rangle$, $\langle\sqrt{n_0}\frac{\hbar}{mc}\frac{\varphi'}{r}\bar l\bar s\rangle$

$$e\varphi = -\frac{e^2}{r} \qquad \varphi = \delta(r)$$

$\langle\frac{\hbar^2}{8m^2c^2}e\Delta\varphi\rangle \equiv 0$ при $l\neq 0$

$\langle\sqrt{n_0}\frac{\hbar}{mc}\frac{\varphi'}{r}\bar l\bar s\rangle \equiv 0$ при $l=0$

$\frac{\varphi'}{r} \sim \frac{e}{r^3}$, а $\langle\frac{1}{r^3}\rangle \equiv \infty$ при $l=0$

$$\Big[\underbrace{\frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r}}_{\text{гамильтониан атома водорода без релятив. поправок}}\Big]R_{ne}(r)\Omega^{\pm}_{j\,m_j} = E_n\underbrace{R_{ne}\Omega^{\pm}_{j\,m_j}}_{\text{обозначим }|\psi\rangle}$$

$$\frac{p^2}{2m}|\psi\rangle = \Big(E+\frac{e^2}{r}\Big)|\psi\rangle$$

$$\frac{p^2}{2m}\Big\{\Big(E+\frac{e^2}{r}\Big)|\psi\rangle\Big\} = \Big(E+\frac{e^2}{r}\Big)\Big(E+\frac{e^2}{r}\Big)|\psi\rangle$$

$$\langle\psi|\frac{p^2}{2m}\cdot\frac{p^2}{2m}|\psi\rangle = \langle\psi|\Big(E+\frac{e^2}{r}\Big)\Big(E+\frac{e^2}{r}\Big)|\psi\rangle$$

$$\langle\frac{p^4}{4m^2}\rangle = E_n^2 + 2E_n\langle\frac{e^2}{r}\rangle + \langle\frac{e^4}{r^2}\rangle$$

$$\langle\frac{\partial H}{\partial l}\rangle = \frac{\partial E}{\partial l}\ ;\quad \langle\frac{e^2}{r}\rangle = -2E_n$$

$n = n_r + l + 1$ — глав. квант. число

$$\langle\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{2l+1}{r^2}\rangle = \frac{2me^4}{2\hbar^2n^3}$$

$$\langle[p_r;H]\rangle = 0 = \langle\frac{e^2}{r^2}\rangle - \langle\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{2l(l+1)}{r^3}\rangle$$

$$\Rightarrow \langle\frac{1}{r^3}\rangle = \dots$$

$$\vec{S}\,\Omega^{+}_{j m_j} = \frac{1}{2}\left(\vec{j}^2 - \vec{l}^2 - \vec{s}^2\right)\Omega^{+}_{j m_j} =$$

$$= \frac{1}{2}\left(\left(l+\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{1}{2}+1\right) - l(l+1) - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)\right)\Omega^{+}_{j m_j} =$$

$$= \frac{l}{2}\,\Omega^{+}_{j m_j}$$

$$\vec{S}\,\Omega_{j m_j} = -\frac{l+1}{2}\,\Omega_{j m_j}$$

В рез-те получим:

$$E_n^{(1)} = \langle H_{es} \rangle = -\frac{m e^4}{2\hbar^2 n^2}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2\left[-\frac{3}{4n^2} + \frac{1}{n}a_\ell\right],$$

где $a_\ell = \begin{cases} \frac{1}{\ell+1} & ;\ \Omega^{+};\ j = \ell + \frac{1}{2} \\ \frac{1}{\ell} & ;\ \Omega^{-};\ j = \ell - \frac{1}{2} \end{cases}$ (везде $\ell \neq 0$)

$a_\ell = \frac{1}{j + \frac{1}{2}}$ — этот ответ включает $\ell = 0$?

Системы тождественных частиц. Бозоны и фермионы.

Постулируется принцип неразличимости тожд. ч-ц:

1 • 2 • — 2 волн. пакета, после их в/д мы уже не знаем, какой из них 1, а какой 2 (т.к. нет понятия траектории)

Если мы меняем местами 2 тожд. ч-цы системы, то сост. сист. существенно не должно

$\psi(x_1, x_2)$ — некое состояние

$P_{12}\,\psi(x_1, x_2) \equiv \psi(x_2, x_1)$ — то же состояние

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

$$\hat{P}_{12}^2\,\psi(x_1, x_2) = \psi(x_1, x_2) = \underbrace{e^{i2\alpha}}_{=\pm 1}\,\psi(x_1, x_2)$$

$$P_{12}\,\psi(x_1, x_2) = \psi(x_2, x_1) = \pm\,\psi(x_1, x_2)$$

„+" — ч-цы Бозе (ч-цы с целым спином, переносчики в/д $\pm, W^{\pm}, Z, g$-глюоны)

„−" — ч-цы Ферми (имеют полуцелый спин, т.н. „материя") $e, \nu_e, \mu, \nu_\mu, \tau, \nu_\tau, n, d, c, s, t, b$

Деление на Б. и Ф. — эмпирическое

$$\hat{P}_{ik}(x_1, \ldots, x_N) = \pm\,\psi(x_1, \ldots, x_N)$$

Нам нужно построить базис в пр-ве тожд. ч-ц, операторы в этом базисе и инт-лы движения.

$$\psi(x_1) = \sum_{n_1} C_{n_1}\,\psi_{n_1}(x_1)$$

$$\psi(x_1, x_2) = \sum_{n_1, n_2} C_{n_1 n_2}\,\psi_{n_1}(x_1)\,\psi_{n_2}(x_2)$$

$$\psi(x_1, x_2) = \mp\,\psi(x_2, x_1)$$

$$\psi(x_1, x_2) = \sum_{A_1 A_2} C_{n_1 n_2}\,\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{n_1}(x_1)\,\psi_{n_2}(x_2) + \psi_{n_1}(x_2)\,\psi_{n_2}(x_1)\right)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{n_1}(x_1)\,\psi_{n_2}(x_2) - \psi_{n_1}(x_2)\,\psi_{n_2}(x_1)\right) -$$

полная антисимметризация (ПАС)

$$\Pi A C\left[\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2)\psi_{n_3}(x_3)\right] =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{6}}\left[\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2)\psi_{n_3}(x_3) + \right.$$

$$+ \psi_{n_1}(x_2)\psi_{n_2}(x_3)\psi_{n_3}(x_1) +$$

$$+ \psi_{n_1}(x_3)\psi_{n_2}(x_1)\psi_{n_3}(x_2) -$$

$$- \psi_{n_1}(x_2)\psi_{n_2}(x_1)\psi_{n_3}(x_3) -$$

$$- \psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_3)\psi_{n_3}(x_2) -$$

$$\left. - \psi_{n_1}(x_3)\psi_{n_2}(x_2)\psi_{n_3}(x_1)\right]$$

Лекция 27

30.09.04

$$\Pi A C\left[\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2)\psi_{n_3}(x_3)\right] = \frac{1}{\sqrt{6}}\sum_p (-1)^{c(p)} \cdot$$

$$\cdot \psi_{n_1}(x_{p_1})\cdot\psi_{n_2}(x_{p_2})\psi_{n_3}(x_{p_3}) \quad (=)$$

$c(p)$ – количество парных перестановок
$(-1)^{c(p)}$ – четность перестановки

1	2	3	} четная, +1
2	3	1	
3	1	2	
2	1	3	} четная, -1
1	3	2	
3	2	1	

$$(=) \frac{1}{\sqrt{3!}} \underbrace{\det \left\| \psi_{n_i}(x_j) \right\|_{3\times 3}}_{\text{det Слэтера}}$$

ψ_{n_i} – базисная в/ф, а произвольная в/ф – линейная комбинация базисных

$$\Pi A C\left[\psi_{n_1}(x_1)\cdot\psi_{n_2}(x_2)\ldots\psi_{n_N}(x_N)\right] =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_p (-1)^{c(p)} \cdot \psi_{n_1}(x_{p_1})\ldots\psi_{n_N}(x_{p_N}) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \left\| \psi_{n_i}(x_j) \right\|_{N\times N}$$

Замечание

1) Принцип Паули:
если $n_k = n_e$, то у матрицы будут 2 одинак. строки $\Rightarrow \det \| \ \| = 0$

=> построить ВФ с 2-мя одинак. кв. числами невозможно

2) 1 2 3 4 (+1)
2 3 4 1 (-1)

Бозоны

базисная ВФ сист. N бозонов — полностью симметризованная ВФ

$$ПС\left[\psi_{n_1}(x_1)\,\psi_{n_2}(x_2)\cdot\ldots\cdot\psi_{n_N}(x_N)\right] =$$

$$= \sum_P \psi_{n_1}(x_{P_1})\ldots\psi_{n_N}(x_{P_N})$$

1) $\psi_1(x_1)\cdot\psi_1(x_2) = 1$, т.к каждая ВФ нормир. на 1

2) $\psi_1(x_1)\psi_1(x_2) + \psi_1(x_2)\psi_1(x_1) = 2\psi_1(x_1)\psi_1(x_2)$

↑ есть 2 варианта

=> при совп. квант. числах условие нормировки не $\frac{1}{\sqrt{N!}}$

1) мы не будем дописывать те перестановки, к-ые явл. тривиальными

2) при этом нормировочный к-т

$$\sqrt{\frac{m_1!\,m_2!\ldots m_N!}{N!}}$$

кв. числа объединены в группы

$\underbrace{n_1\ n_2\ n_3}_{\text{одинаковые, их } m_1 \text{ штук}}\ \ldots\ \underbrace{n_{N-1}\ n_N}_{m_N \text{ штук}}$

$\sum m_i = N$

напр., для 3х бозонов:

$$\psi_1(x_1)\psi_1(x_2)\psi_2(x_3) + \psi_1(x_1)\psi_1(x_3)\psi_2(x_2) +$$

$$+ \psi_1(x_3)\psi_1(x_1)\psi_1(x_2) \text{ — 3 слагаемых}$$

$$\sqrt{\frac{2!\cdot 1!}{3!}} = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

Операторы для систем N тождеств. частиц

Пусть есть 2 тожд. спина, их ВФ?

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\downarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\uparrow\rangle$$

возьмем оператор

$$S_z^{(1)}|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{1}{2}|\uparrow\downarrow\rangle\right) - \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{1}{2}\right)|\downarrow\uparrow\rangle =$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right) \text{ — для}$$

электронов такого не бывает, т.к. это — не антисим. конструкция

Выведем усл. к-ым оператор должен удовлетв.:

1) усл. на ВФ

$$P_{ik}|\psi\rangle = \pm|\psi\rangle \quad \begin{matrix}Б\\Ф\end{matrix}, \text{ причем}$$

$$P_{ik}^2 = 1, \quad P_{ik}^+ = P_{ik}$$

$P_{ik}^+ P_{ik} = 1$ => P — унит. и эрмитов

∀ матр эл. ∀ оп-ра A:

$\langle \psi | A | \chi \rangle$ =

$x_i \to x_j$, $x_j \to x_i$ $\Rightarrow |\chi\rangle \to |\hat{\chi}\rangle = P_{ij} |\chi\rangle$

$A \to \hat{A}$

$\langle \hat{\psi}| \Rightarrow \langle \psi | P_{ij}^+$

$\langle \psi | A | \chi \rangle \to \langle \hat{\psi} | \hat{A} | \hat{\chi} \rangle$

$\langle \psi | A | \chi \rangle = \langle \psi | \frac{б}{ф} 1 \; \hat{A} \; (\frac{б}{ф} 1) | \chi \rangle$

$\Rightarrow A \equiv \hat{A}$ – оператор полностью симметрии относ. замены частиц

$\hat{A} = P^+ A P = A$; $PAP = A$

оператор перестановки

$P^* A P = PA$

$\boxed{[P, A] = 0}$

Примеры:

$S_z^{(1)}$ – не годится

$S_z^{(1)} + S_z^{(2)}$ ← годится

$S^{(1)} \cdot S^{(2)}$ ↙ ↓

$(S_z^{(1)})^2 + (S_z^{(1)})^2$ (физически бессмысленно)

интеграл движения

$[C; H] = 0 \Rightarrow C$ – инт-л движ.

многоэлектронные атомы

1 Приближение центрального поля

$$H = \sum_{k=1}^{N} \left(\frac{p_k^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_k} \right) + \sum_{k<e} \frac{e^2}{r_{ke}}$$

Ядро $Z = N$ в ионе

ПАС $[\psi_{n_1 e_1 m_1}(r_1) \cdot |\downarrow\rangle_1 \cdot \psi_{n_2 e_2 m_2} |\uparrow\rangle_2 \cdot \ldots \cdot \psi_{n_N e_N m_N} \cdot |\uparrow\rangle]$

$E^{(0)} = E_{n_1} + E_{n_2} + \ldots + E_{n_N}$

из экспер. фактов $\Rightarrow$ орбит. момент сохраняется

$\Rightarrow$ усредненное центр.-сим. поле + поправки

усред. поле создается ядром и всеми остальными электронами – это и есть прибл. центр.-сим. самосогл. поля $V(|\vec{r}|)$

$$H = \underbrace{\sum_{k=1}^{N} \left[\frac{p_k^2}{2m} + V(|\vec{r}_k|) \right]}_{H_0} + \sum_{k=1}^{N} \left(-V(|\vec{r}_k|) - \right.$$

$$-\frac{Ze^2}{r_k}\Big) + \sum_{k<l} \frac{e^2}{r_{kl}}$$

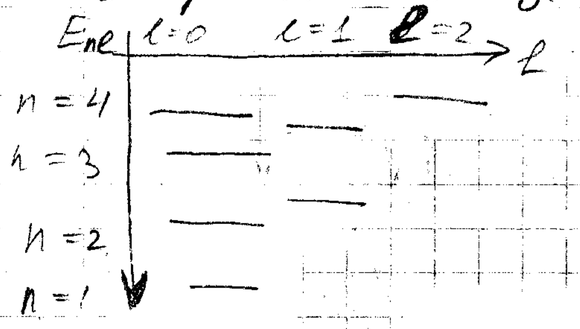
Уровни энергии хар-ются главным квант. числом n, а т.к. пот-л сферич-сим., то еще ~~...~~ есть ~~...~~ l, m. Кроме того, $\exists$ спин

$m \equiv m_l$

$\uparrow$ } m_s $+1/2$

$\downarrow$ } m_s $-1/2$

Энергия не зависит от m_l, но зав. от l



$$|\psi^{(0)}\rangle = \text{ПАС}\left[\tilde{\psi}_{n_1 l_1 m_1}(r_1)|\uparrow\rangle_1 + \ldots + \tilde{\psi}_{n_N l_N m_N}(r_N)|\uparrow\rangle_N\right]$$

$$E^{(0)} = E_{n_1 l_1} + E_{n_2 l_2} + \ldots + E_{n_N l_N}$$

|| сов-ть $[n_1, l_1, \ldots, n_N, l_N]$ - конфигурация

пишется в квант. механике $1s^2 2s^2 2p^3 \ldots$ в химии

$n_1 = n_2 = 1$, $l_1 = l_2 = 0$; $n_3 = n_4 = 2$, $l_3 = l_4 = 0$; $n_5 = n_6 = n_7 = 2$, $l_5 = l_6 = l_7 = 1$

$m_{si} = \pm 1/2$

$m_{li} = -l_i \ldots + l_i$

Применим ТВ

1) Суммарный орбит. момент атома $\vec{L} = \sum_{k=1}^{N} \vec{l}^{(k)}$ — интеграл движения

$$[\vec{L}, H_0 + H_I] = 0$$

2) $\forall$ спина $[\vec{S}^{(3)}, H_0 + H_I] = 0$,

т.к. спин в гамильтониан не входит

т.к. ч-цы тожд-ны, то

$\vec{S} = \sum_{k=1}^{N} \vec{S}^{(k)}$ — интеграл движения

других инт-лов движения нет!

Заметим, что

$[L_i; L_j] \neq 0$

$[S_i; S_j] \neq 0$

$\Rightarrow$ некоммутирующие интегралы движения $\Rightarrow$ вырождение уровней энергии по L_z и S_z

M_L M_S

$-L \le M_L \le L$ $2L+1$ значение

$-S \le M_S \le S$ $2S+1$ значение

кратность вырождения $(2L+1)(2S+1)$

Терм - состояние с опред. S и L

$$l^2|lm\rangle = l(l+1)|lm\rangle$$

$$l_z|lm\rangle = m|lm\rangle$$

$$l_+|lm\rangle = \sqrt{(l-m)(l+m+1)}\,|l\,m+1\rangle$$

$$l_-|lm\rangle = \sqrt{(l+m)(l-m+1)}\,|l\,m-1\rangle$$

старший вектор $|ll\rangle$

Лекция 28

7.10.04

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

$$\left.\begin{array}{l} l_+|\psi\rangle = 0 \\ l_z|\psi\rangle = l|\psi\rangle \end{array}\right\} \Rightarrow |\psi\rangle \equiv |l, m=l\rangle$$

$$l_-^u|l, m=l\rangle = \underbrace{\sqrt{\ }\cdot\sqrt{\ }\ldots\sqrt{\ }}_{u \text{ штук}}|l, m=l-u\rangle$$

если:

$$\begin{cases} L_+|\psi\rangle = 0 \\ L_z|\psi\rangle = L|\psi\rangle \\ S_+|\psi\rangle = 0 \\ S_z|\psi\rangle = S|\psi\rangle \end{cases} \Rightarrow \text{то } |\psi\rangle \equiv |L, M_L=L, S, M_S=S\rangle$$

Зная старший вектор, можно построить $\forall$ вектор терма:

$$L_-^u S_-^v|L, M_L=L, S, M_S=S\rangle = \underbrace{\sqrt{\ }\ldots\sqrt{\ }}_{u \text{ штук}}\underbrace{\sqrt{\ }\ldots\sqrt{\ }}_{v \text{ штук}}\cdot$$

$$\cdot|L; M_L=L-u; S, M_S=S-v\rangle$$

для $2p^2$: ПАС $\left[\psi_{n_1=2\ l_1=1, m_{l_1}=-1}(r_1)|\uparrow\rangle_1 * \psi_{n_2=2, l_2=1, m_{l_2}=0}(r_2)|\downarrow\rangle_2\right] =$

$$= \begin{pmatrix} m_{l_1} & m_{l_2} \\ -1 & 0 \\ \uparrow & \downarrow \\ m_{s_1} & m_{s_2} \end{pmatrix} \equiv -\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ \downarrow & \uparrow \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \downarrow & \downarrow \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \downarrow & \downarrow \end{pmatrix} \Rightarrow = 0 \text{ (принцип Паули)}$$

возьмем

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix}$$

$$l_z|\psi\rangle = \left(l_z^{(1)} + l_z^{(2)}\right)\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix} =$$

$= (m_{l_1} + m_{l_2}) \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix} = (-1) \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix}$

$S_z |\psi\rangle = (S_z^{(1)} + S_z^{(2)}) |\psi\rangle =$

$= (m_{s_1} + m_{s_2}) \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix} = 0 \cdot \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix}$

$L_+ |\psi\rangle = \sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix} +$

$+ \sqrt{2} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix}$

$S_+ |\psi\rangle = (S_1^{(+)} + S_2^{(+)}) \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix}$

$S_1^{(+)} |\uparrow\rangle_1 = 0$

$S_2^{(+)} |\downarrow\rangle_2 = |\uparrow\rangle$

$S_+ |\psi\rangle = 0 + \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ \uparrow & \uparrow \end{pmatrix}$

1. $m_l = \begin{matrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{matrix}$ $\quad m_s = \pm \frac{1}{2}$

в $2p^2$ $\quad 6 \cdot 5/2 = 15$ волновых функций

кратность вырожд. терма

$(2L+1)(2S+1)$

$L = 2, 1, 0$

$S = 1, 0$

$M_L = 2 = m_{l_1} + m_{l_2}$

$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix}}_{\text{старший вектор}}$ $\quad M_S = m_{s_1} + m_{s_2}$

$L = 2$

$S = 0$ $\quad {}^1D$

число состояний $5 \cdot 1 = 5$

возьмем „с потолка" другой терм

$M_S = 1 = m_{s_1} = m_{s_2}$

$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \uparrow & \uparrow \end{pmatrix}$ $\quad {}^3P$

число состояний $3 \cdot 3 = 9$

$\cancel{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix}}$ $\quad {}^1S$

1 состояние

$L_z \to M_L = 0 = L$

$S_z \to M_S = 0 = S$

$m_{l_1} + m_{l_2} = M_L = 0$

$m_{s_1} + m_{s_2} = M_S = 0$ $\quad \exists 3$ ВФ:

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

сосудим из них произв. ЛК:

$|4\rangle = a\left(\begin{smallmatrix}0 & 0\\ \uparrow & \downarrow\end{smallmatrix}\right) + b\left(\begin{smallmatrix}1 & -1\\ \uparrow & \downarrow\end{smallmatrix}\right) + c\left(\begin{smallmatrix}-1 & 1\\ \uparrow & \downarrow\end{smallmatrix}\right)$

$L_+|4\rangle = 0$
$S_+|4\rangle = 0$ | тогда это будет старший вектор терма

$L_+|4\rangle = a\sqrt{2}\left(\begin{smallmatrix}1 & 0\\ \uparrow & \downarrow\end{smallmatrix}\right) + a\sqrt{2}\left(\begin{smallmatrix}0 & 1\\ \uparrow & \downarrow\end{smallmatrix}\right) +$

$+ b\cdot 0 + b\sqrt{2}\left(\begin{smallmatrix}-1 & 0\\ \uparrow & \downarrow\end{smallmatrix}\right) + c\sqrt{2}\left(\begin{smallmatrix}0 & 1\\ \uparrow & \downarrow\end{smallmatrix}\right) + c\cdot 0 = 0 \Rightarrow$

$\Rightarrow \begin{matrix} a+b=0 \\ a+c=0 \end{matrix}$

⊕ усл. нормировки $\Rightarrow a = \frac{1}{\sqrt{3}},\ b = c = -\frac{1}{\sqrt{3}}$

$S_+|4\rangle = 0$ (можно проверить)

Замечание:

то, что мы построили — одна конфигурация $1s^2 2s^2 2p^2$

p^6 : $\begin{matrix}1 & 0 & -1 & 1 & 0 & -1\\ \uparrow & \uparrow & \uparrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow\end{matrix}$ ^1S

⇒ заполненные оболочки не вносят вклад в L и S

Диаграммы Юнга

N – число электронов
1-2 строки
длина строк $\le 2l+1$
верхняя длиннее / равна нижней

1) в клетках ставить $\uparrow$ и $\downarrow$, все возможные перестановки

2) ПС по строкам

напр. $\begin{matrix}a & b\\ c & d\end{matrix} \to \begin{matrix}a & b\\ c & d\end{matrix} + \begin{matrix}b & a\\ c & d\end{matrix} \to$

$\to \begin{matrix}ab\\ cd\end{matrix} + \begin{matrix}a & b\\ d & c\end{matrix} + \begin{matrix}b & a\\ c & d\end{matrix} + \begin{matrix}ba\\ dc\end{matrix}$

3) ПАС по столбцам

$\begin{matrix}a\\ b\end{matrix} \to \begin{matrix}a\\ b\end{matrix} - \begin{matrix}b\\ a\end{matrix}$

для $\begin{matrix}a & b\\ c & d\end{matrix}$ будет 16 слагаемых !

4) ЛНЗ

$\begin{matrix}a\\ b\end{matrix} \to \begin{matrix}a\\ b\end{matrix} - \begin{matrix}b\\ a\end{matrix}$

$\begin{matrix}b\\ a\end{matrix} \to \begin{matrix}b\\ a\end{matrix} - \begin{matrix}a\\ b\end{matrix}$) они ел. 3

5) $M_S = \sum_{i=1} m_{s_i}$

6) из каждого M_S сопоставляются полные спины, к-ые они могут соответствовать

напр.,

$M_S = \cancel{2}\ \cancel{1}\ \cancel{1}\ \cancel{0}\ \cancel{0}\ \cancel{-1}\ \cancel{-1}\ \cancel{-2}$

$S = 2$
$S = 1$

---

7) Сопряженная ДЮ (строки ↔ столбцы)

8) В ДЮ расставляются m_l

9) ПАС ↔

10) ПАС ↕

11) ЛНЗ

12) $M_L = \sum_{i=1}^{N} m_{l_i}$

13) из набора M_L извлекаются L

Получится что одной ДЮ соответствует набор ВФ. Все возм. комбинации S и L соотв. термам

напр. $S = 1$, $L = 1, 2$ $\quad {}^3P,\ {}^3D$

Пример:

$2p^2$

		ПС	M_S
↑↑	→	↑↑	1
↑↓	→	↑↓ + ↓↑ ↺ЛЗ	0
↓↑	→	↑↓ + ↓↑	
↓↓	→	↓↓	−1

$\boxed{S = 1}$

$\cancel{1}$ $\quad 1 \to 1 - 0$ $\quad 1 \to 1 + -1$
$\cancel{1}$ $\quad 0 \quad 0 \quad 1$ $\quad -1 \quad -1 \quad 1$

$0 \to 0 + 1$ $\quad \cancel{0}$ $\quad 0$
$1 \quad 1 \quad 0$ $\quad \cancel{0}$ $\quad -1$

$\cancel{1} \to -1 + 1$ $\quad -1$ $\quad \cancel{-1}$
$1 \quad 1 \quad -1$ $\quad 0$ $\quad \cancel{-1}$

$M_L = 1, 0, -1$
$L = 1$

Получим терм ${}^3P$

$\cancel{\uparrow}$ $\quad \uparrow\downarrow \to \uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow$ $\quad M_S = 0$
$\cancel{1}$ $\quad S = 0$

1	1
1	0
1	−1
0	0
0	−1
−1	−1

M_L: 2 1 0 0 −1 −2

$L = 2, L = 0$

Получим термы ${}^1D$, ${}^1S$

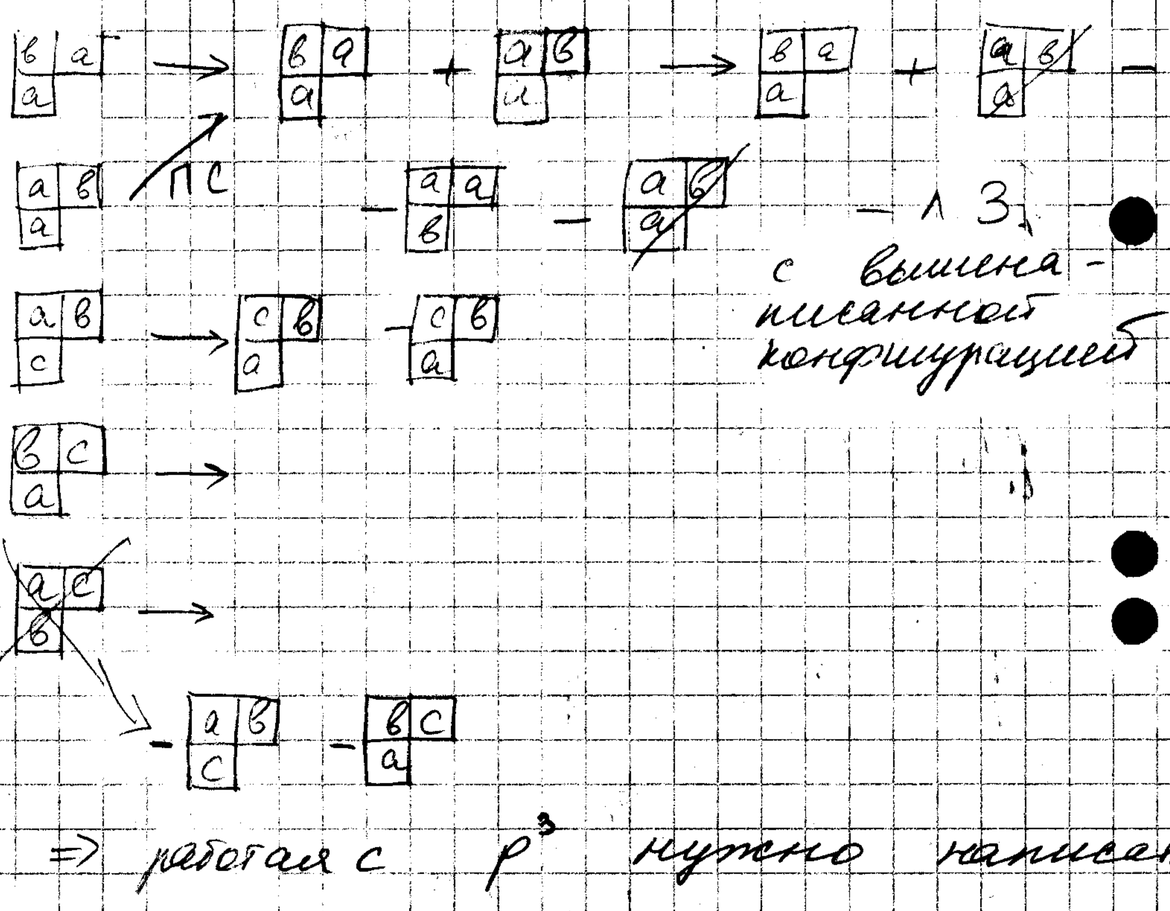
Лекция 29

14.10.04

1) Больше 2х строк быть не может, т.к. ПАС все занулит. Больше клеточек в строке, чем $2l+1$ тоже быть не может

2) $\begin{array}{|c|c|}\hline a & a \\ \hline a & \\ \cline{1-1}\end{array} \to \begin{array}{|c|c|}\hline a & a \\ \hline a & \\ \cline{1-1}\end{array} - \begin{array}{|c|c|}\hline a & a \\ \hline a & \\ \cline{1-1}\end{array} = 0$

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



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

$\vec{L}$ $\vec{S}$ - инт. мы движения они коммутируют с H_I

$$\langle L'S'M_L'M_S' | H_I | L S M_L M_S \rangle =$$

$$= \delta_{LL'}\,\delta_{SS'}\,\delta_{M_LM_L'}\,\delta_{M_SM_S'}$$

H_I – скалярный оператор, он диагонален, не зав. от M_L и M_S

$$|\Psi_1\rangle = \begin{pmatrix} \uparrow & 0 \\ \uparrow & \uparrow \end{pmatrix} = |\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 \cdot$$

$$\cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\tilde{\Psi}_{211}(\vec{r}_1)\,\tilde{\Psi}_{210}(\vec{r}_2) - \tilde{\Psi}_{211}(\vec{r}_2)\,\tilde{\Psi}_{210}(\vec{r}_1) \right)$$

∀ ВФ 2х-электронного атома раздваивается на спиновую и орбит. часть, но для 3х электронного атома это далеко не так

$$|L=2, M_L=1, S=0, M_S=0\rangle =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \uparrow & 0 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \uparrow & 0 \\ \downarrow & \uparrow \end{pmatrix} =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 - |\uparrow\rangle_2 |\downarrow\rangle_1 \right) \cdot$$

$$\cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\tilde{\Psi}_{211}(\vec{r}_1)\,\tilde{\Psi}_{210}(\vec{r}_2) + \tilde{\Psi}_{211}(\vec{r}_2)\,\tilde{\Psi}_{210}(\vec{r}_1) \right)$$

$$\langle \Psi_1 | V(r_1) | \Psi_1 \rangle = \left[\begin{array}{ll} \langle\uparrow|\uparrow\rangle = 1 & \langle\uparrow|\downarrow\rangle = 0 \\ \int dz\, \tilde{\Psi}_{211}^*(z)\,\tilde{\Psi}_{210}(z) \equiv 0 & \\ \int dz\, \tilde{\Psi}_{211}^*(z)\,\tilde{\Psi}_{211}(z) \equiv 1 & \end{array} \right] =$$

$$= \frac{1}{2} V_1 + \frac{1}{2} V_0, \text{ где}$$

$$V_1 = \int dz \left|\Psi_{211}(z)\right|^2 V(z)$$

$$V_0 = \int dz \left|\Psi_{210}(z)\right|^2 V(z)$$

$\langle \Psi_2 | V(r_1) | \Psi_2 \rangle = \frac{1}{2} V_1 + \frac{1}{2} V_0$

$\langle \Psi_2 | V(r_1) + V(r_2) | \Psi_2 \rangle = V_1 + V_0$

$\langle \Psi_1 | V(r_1) + V(r_2) | \Psi_1 \rangle = V_1 + V_0$ } одинаково

$\langle \Psi_1 | \frac{e^2}{r_{12}} | \Psi_1 \rangle = K_{10} - I_{10}$, где

$K_{10} = \int |\tilde{\Psi}_{211}(r_1)|^2 |\tilde{\Psi}_{210}(r_1)|^2 \frac{e^2}{r_{12}}$

$I_{10} = \int \tilde{\Psi}_{211}^*(r_1) \tilde{\Psi}_{210}(r_1) \cdot \tilde{\Psi}_{210}^*(r_2) \cdot$

$\cdot \Psi_{211}(r_2) \cdot \frac{e^2}{r_{12}} dr$

$\langle \Psi_2 | \frac{e^2}{r_{12}} | \Psi_2 \rangle = K_{10} + I_{10}$

K_{10} - кулоновский интеграл

I_{10} - обменный интеграл

$K_{10}, I_{10} > 0 \Rightarrow$ терм со спином 0 лежит на $2I_{10}$ выше, чем терм со спином 1

P^3

терм с максимальным спином

$|\Psi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ \uparrow & \uparrow & \uparrow \end{pmatrix}$ $S = 3/2$

легко проверить, что

$\langle \Psi_1 | V(r_1) + V(r_2) + V(r_3) | \Psi_1 \rangle = V_1 + V_0 + V_{-1}$

аналогично $\langle \Psi_2 | V(r_1) + V(r_2) + V(r_3) | \Psi_2 \rangle = V_1 + V_0 + V_{-1}$

брав старший вектор

$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ \uparrow & \downarrow & \uparrow \end{pmatrix} = |L=2, M_L=2, S=\frac{1}{2}, M_S=\frac{1}{2}\rangle$

нет смысла, поэтому для сравнения энергии возьмем Ψ_2:

$|\Psi_2\rangle = |L=2, M_L=0, S=\frac{1}{2}, M_S=\frac{1}{2}\rangle =$

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

$+ \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 \\ \uparrow & \downarrow & \uparrow \end{pmatrix}$

легко проверить, что

$\langle \Psi_2 | V(r_1) + V(r_2) + V(r_3) | \Psi_2 \rangle = V_1 + V_0 + V_{-1}$

$\langle \Psi_1 | \frac{e^2}{r_{12}} + \frac{e^2}{r_{23}} + \frac{e^2}{r_{31}} | \Psi_1 \rangle = K_{1,0} + K_{1,-1} + K_{0,-1}$

$- I_{10} - I_{1,-1} - I_{0,-1}$

$\langle \Psi_2 | \frac{e^2}{r_{12}} + \frac{e^2}{r_{23}} + \frac{e^2}{r_{31}} | \Psi_2 \rangle = K_{1,0} + K_{1,-1} + K_{0,-1}$

$- I_{1,-1} + \frac{1}{2} I_{1,0} + \frac{1}{2} I_{0,-1}$

энергия со спином 1/2 > энергии терма со спином 3/2

$\Rightarrow$ 1 правило Хунда выполняется

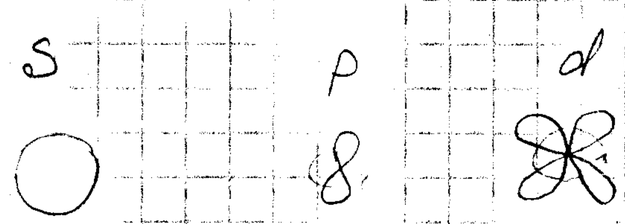
Общее док-во:
чем больше спин, тем больше знаков „–" в ВФ $\Rightarrow$ тем больше знаков „–" в интегралах

Неправильное д-во:
чем больше спин, тем более сим. спиновая часть ВФ, тем более антисим. коорд. часть ВФ, тем ~~бо~~ меньше средняя энергия кулоновского отталкивания (обменные интегралы с „–") неправильно, т.к. $\nexists$ спиновой и коорд. части ВФ

---

2) $S_1 = S_2$ $\quad \uparrow L \quad \downarrow E$

Объяснение:
ВФ 1 частицы:



чем $> l$, тем больше осциллирует ВФ в пр-ве

чем $>$ суммарный момент L, тем $>$ осцилляций в $3N$-мерном пр-ве $\Rightarrow$ тем меньше среднее значение попарного кулоновского отталкивания всех N электронов (по лемме Римана) $\Rightarrow$ тем меньше энергия терма

Тонкая структура термов

$$H_{LS} = \sum_{k=1}^{N} g(r_k)\, \vec{l}^{(k)}\, \vec{s}^{(k)}$$

как выглядит $g(r_k)$ нам не важно, надо только учесть, что $g \uparrow\uparrow$ при $\uparrow z$

$H_I \gg H_{LS}$ вплоть до $z \le 40 \div 50$

для всех остальных $H_I \sim H_{LS}$

$H_I \ll H_{LS}$ практически не бывает

$H_I \gg H_{LS}$ – приближение LS-связи

$H_I \ll H_{LS}$ – приближение j-j-связи

для $H_I \sim H_{LS}$ ничего опред. сказать нельзя

Лекция 30

19.10.04

Приближение LS-связи

Вспомним:

1) Скалярный оператор $[l_i, A_i] = 0$
(скалярный отн. l_i)

$$\langle l'm' | A_i | lm \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} a(l)$$

2) Векторный оператор

$$[l_i, B_i] = i \varepsilon_{ijk} B_k$$

$$\langle l'm' | B_i | lm \rangle = \frac{\langle lm' | lB | lm \rangle}{l(l+1)} \cdot \langle lm' | l_i | lm \rangle$$

одинаковы

3) $1 = \sum_n P_n = \sum_n |n\rangle\langle n|$

проектор

Теорема:
в пределах терма (при фикс. L и S):

$$\langle LS\, M_L' M_S' | H_{LS} | LS M_L M_S \rangle =$$

$$= \langle LS\, M_L' M_S' | A \cdot \vec{L} \cdot \vec{S} | LS M_L M_S \rangle$$

некая константа

Д-во:

$$H_{LS} = \sum_{n=1}^{N} g(r_n) \cdot l^{(n)} s^{(n)}$$

сферич симметрич.

возьмем n-ое слагаемое

$$\sum_{\substack{L''S''\\ M_L''M_S''}} \langle LSM_L'M_S' | g(r_n)\vec{l}^{(n)} | L''S''M_L''M_S''\rangle \underbrace{\vec{S}^{(n)}}_{\langle L''S''M_L''M_S''|} | LSM_LM_S\rangle$$

Учитываем, что

$$[L_i ; S_j^{(n)}] = 0, \text{ т.к.}$$

они относятся к разным степеням свободы

$\Rightarrow S_j$ отн. L_i скаляр $\Rightarrow$

этот матричный элемент диагонален по L $\Rightarrow$ сумма по L'' стирается, пишем везде вместо $L'' \to L$

$$[S_i ; g(r_n) l_j^{(n)}] = 0$$

$\Rightarrow l_j^{(n)}$ - скаляр отн. S

$\Rightarrow$ убирается Σ по S''

оператор $[S_i ; S_j^{(n)}] =$ (см. предыд. семестр)

$= i\varepsilon_{ijk} S_k^{(n)} \Rightarrow S^{(n)}$ - вект. оператор

$\Rightarrow$ слева и справа одно и то же S

$$[L_i ; g(r_n)] = 0$$

$$[L_i ; l_j^{(n)}] = i\varepsilon_{ijk} L_k^{(n)}$$

$\Rightarrow$ отн. L $\quad l^{(n)} g(r_n)$ - вект. оператор

$$\Rightarrow \sum_{M_S''M_L''} \langle LSM_L'M_S' | C''\vec{L} | LSM_L''M_S''\rangle \cdot \langle LSM_L''M_S'' | C'\vec{S} | LSM_LM_S\rangle =$$

$$= \langle LSM_L'M_S' | C''\vec{L}\cdot C'\vec{S} | LSM_LM_S\rangle$$

теперь надо просуммировать по всем электронам:

$$\langle LSM_L'M_S' | \sum_{n=1}^{N} g(r_n)\vec{l}^{(n)}\vec{S}^{(n)} \cdot | LSM_LM_S\rangle = \langle LSM_L'M_S' | A\vec{L}\vec{S} \cdot | LSM_LM_S\rangle$$

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

$$|LSM_LM_S\rangle \xrightarrow{\text{переход к др. базису}} |LSJM_J\rangle$$

$$J = |L-S|, |L-S|+1, \dots, L+S-1, L+S$$

$$J_z = M_J = -J, \dots, +J$$

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

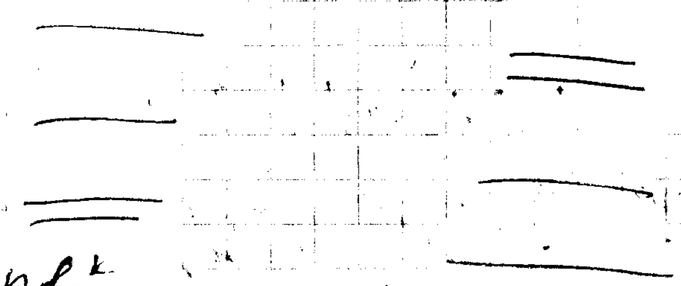
$$\Rightarrow \langle LSJ'M_J' | A\vec{L}\vec{S} | LSJM_J\rangle = \delta_{JJ'}\delta_{M_JM_J'} \cdot \frac{A}{2}\big(J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\big)$$

$\Rightarrow$ это и есть поправки к энергии терма

$$\Delta E_{LS} = \frac{A}{2}\left(J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\right)$$

$$\boxed{E_{J+1} - E_J = A(J+1)}$$ — правило Ланде

$A > 0$ $\qquad$ $A < 0$



$n\ell^k$

Если оболочка заполнена менее, чем наполовину, т.е.

$k \le 2\ell+1$, то $A > 0$,

если $k > 2\ell+1$, то $A < 0$

| В правило Хунда

Д-во

A - универ. в пределах терма

Возьмем соответствие с S и L max.

$$\underbrace{|L\ S\ M_L = L\ M_S = S\rangle}_{|\psi\rangle} = |A\vec{L}\vec{S}|L\,S\,M_L = L\,M_S = S\rangle =$$

$$= \langle\psi|A L_z S_z + \frac{A}{2}\cancel{L_+ S_-} + \frac{A}{2}\cancel{L_- S_+}|\psi\rangle =$$

+ к тем рассм. диаг. матр. элементы, а L_+ и S_- меняют $|\psi\rangle$

$$= A \cdot L \cdot S$$

а) если $k \le 2\ell+1$, тогда для старшего вектора

$|\psi\rangle = |L, S, M_L = L, M_S = S\rangle =$ ~~(к-е ?)~~

$$= \begin{pmatrix} \ell & \ell-1 & \dots & \ell-k+1 \\ \uparrow & \uparrow & & \uparrow \end{pmatrix}; \quad \langle\psi|H_{LS}|\psi\rangle =$$

(раньше обозначали N)

$$= \langle\psi|\sum_{n=1}^{k} g(r_n)\cdot\left(\ell_z^{(n)} S_z^{(n)} + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{2}\ell_+^{(n)} S_-^{(n)} + \frac{1}{2}\ell_-^{(n)} S_+^{(n)}\right)|\psi\rangle =$$

$$= \left[\text{расписали все ф-ции, у всех электронов одинаковые, } \Rightarrow \text{результат интегрирования обозначим } \langle g\rangle\right] = \langle g\rangle \cdot$$

$$\cdot \underbrace{\sum_{n=1}^{k}(L - n + 1)\cdot\frac{1}{2}}_{L_z = L} = \frac{1}{2} L \cdot \langle g\rangle \ge 0$$

$$\Rightarrow A \ge 0$$

б) $k > 2\ell+1$

$$|\psi\rangle = \Big(\underbrace{\begin{matrix} \ell & \ell-1 & & -\ell & \ell & \ell-1 & \dots & \ell-a+1 \\ \uparrow & \uparrow & \dots & \uparrow & \downarrow & \downarrow & \dots & \downarrow \end{matrix}}_{2\ell+1}\Big)_{k}$$

$$a = k - (2\ell+1)$$

$$\langle\psi|\sum_{n=1}^{k} g(r_n)\left(\ell_z^{(n)} S_z^{(n)} + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{2}\ell_+^{(n)} S_-^{(n)} + \frac{1}{2}\ell_-^{(n)} S_+^{(n)}\right)|\psi\rangle =$$

$$= \langle g\rangle \cdot \left[\sum_{n=1}^{2\ell+1}(L - n + 1)\left(+\frac{1}{2}\right) + \right.$$

$$\left. + \underbrace{\sum_{n=1}^{a}(L-n+1)}_{L_z = L}\cdot\left(-\frac{1}{2}\right)\right] = -\frac{1}{2}\langle g\rangle L \Rightarrow A < 0$$

Многоэлектронные атомы в полях

1) магнитное поле.

гамильтониан в/д атома с полем

$$H_H = \sum_{n=1}^{N} -\mu_0 l^{(n)} H - 2\mu_0 S^{(n)} H =$$

гиромагн. отношение для спина

$$= -\mu_0 H (\vec{L} + 2\vec{S})$$

а) $H_H \ll H$ релятивистских поправок

б) $H_H \sim H$ рел. поправок
задача не решается в общем виде

но $H_H \ll H_I$
термы не разруш. а тонкая структура термов разруш.

в) $H_H \ll H_I$

$H_H \gg H_{LS}$

Рассм. а)

$$\boxed{H_0 \gg H_I \gg H_{LS} \gg H_H}$$

Зхолобная ТВ

каждый из $2J+1$ уровней приобретает свою энергию.
(эффект Зеемана)

$$\langle LSJM_J' | H_H | LSJM_J \rangle =$$

$$H_H = -\mu_0 H_z (L_z + 2S_z)$$

$$J_z + S_z$$

$$= (-\mu_0 H_z) \cdot \delta_{M_J M_J'} \cdot M_J +$$

$$+ (-\mu_0 H_z) \langle LSJM_J' | S_z | LSJM_J \rangle$$

По т-ме Вигнера-Эккарта

$$[J_i, S_j] = i\varepsilon_{ijk} S_k$$

$$\langle LSJM_J' | \vec{S} | LSJM_J \rangle =$$

$$= \frac{\langle LSJM_J'' | \vec{S}\vec{J} | LSJM_J'' \rangle}{J(J+1)} \cdot$$

$$\cdot \langle LSJM_J' | \vec{J} | LSJM_J \rangle$$

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

$$\langle LSJM_J' | S_z | LSJM_J \rangle =$$

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

$\cdot \delta_{M_J M_J'} \cdot M_J$ — гамильт. возмущения диагонален

$$E^{(1)}_{M_J} = -\mu_0 H_z M_J \cdot \left[1 + \frac{1}{2}\frac{S(S+1) + J(J+1) - L(L+1)}{J(J+1)}\right]$$

в квадратных скобках стоит фактор Ланде

$$\boxed{H_c \gg H_I \gg H_H \gg H_{LS}} \quad (\text{сильное поле})$$

$$\langle LSM_L'M_S' | H_H | LSM_LM_S \rangle =$$

$$= -\mu_B H_z (M_L + 2M_S)\, \delta_{M_LM_L'}\, \delta_{M_SM_S'}$$

$M_L' + 2M_S'$ – вырождение

$$\langle LSM_L'M_S' | H_{LS} | LSM_L'M_S' \rangle = \lambda |A_{LS}| =$$

21.10.04 **Лекция 31**

$$= \Big[LS = L_z S_z + \underbrace{\frac{1}{2} L_+ S_-}_{\neq 0 \text{ при}} + \frac{1}{2} L_- S_+$$

$$\begin{cases} M_L' = M_L + 1 \\ M_S' = M_S - 1 \end{cases} \Big| \; M_L' + 2M_S' = M_L + 2M_S - 1$$

это слагаемое дает нулевой вклад

аналогично $L_- S_+ \neq 0$ только при

$$\begin{cases} M_L' = M_L - 1 \\ M_S' = M_S + 1 \end{cases} \Big| \; M_L' + 2M_S' \neq M_L + 2M_S$$

отлается только 1 слагаемое $\Big]$

$$= \underbrace{A \cdot M_L \cdot M_S}_{E^{(1)}_{M_LM_S}} \delta_{M_LM_L'}\, \delta_{M_SM_S'}$$

Электрическое поле

а) $H_0 \gg H_Б \gg H_{LS} \gg H_E$

поле ориентировано вдоль z

$$H_E = \sum_{n=1}^{N} \underbrace{-e x_n}_{\text{суммарный дип. момент}} \vec{E} = -\vec{\mathcal{D}} \cdot \vec{E} =$$

$$= -\mathcal{D}_z E_z$$

$$\langle LSJM_J' | \mathcal{D}_z E_z | LSJM_J \rangle = 0,$$

т.к. никаких спиновых операторов здесь нет, этот матричный элемент, равен "– самому себе"

$\Rightarrow$ нужно считать во втором порядке ТВ

$$E^{II} \sim \langle LSJM_J' | J_z J_z + \gamma^2 | LSJM_J \rangle$$

докажем это:

b_i – вектор

$\mathcal{D}_{ij}$ – тензор 2 ранга

$$\mathcal{D}_{ij} = \frac{1}{2} (b_i b_j + b_j b_i)$$

$$[l_i, \mathcal{D}_{jk}] = i \varepsilon_{ijs} \mathcal{D}_{sk} + i \varepsilon_{iks} \mathcal{D}_{js}$$

по т-ме вектора – эквивалентно

$$\langle lm' | \mathcal{D}_{ij} | lm \rangle = \langle lm' | c \cdot \frac{1}{2} (l_i l_j + l_j l_i) + c' l^2 | lm \rangle$$

$$\Rightarrow \langle lm' | \mathcal{D}_{zz} | lm \rangle \sim c m^2 \delta_{mm'} + \underbrace{+ c' l(l+1) \delta_{mm'}}_{\text{не зав. от } m}$$

$$E^{(2)} = \sum_n \frac{|\langle \Psi_n | - E_z \mathcal{D}_z | \Psi_0 \rangle|^2}{E_0 - E_n} =$$

n — все возможные термы $n_1'', l_1'', \ldots, n_N'', l_N''$ $L'' S'' M_L'' M_S''$

E_n — энергия уровня n-ый расщепляется полем

$$= \langle \Psi_0 | - E_z \mathcal{D}_z \underbrace{\left[\sum_n \frac{|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|}{E_0 - E_n} \right]}_{G_0'} (- E_z \mathcal{D}_z) | \Psi_0 \rangle =$$

$$= E_z^2 \langle \Psi_0 | \mathcal{D}_z G_0' \mathcal{D}_z | \Psi_0 \rangle$$

G_0' — скаляр т.к. там суммир. по всем M_L'' и M_S''

$\left[\mathcal{D}_z G_0' \mathcal{D}_z \right]$ — нек. тензор с компонентами zz

$$\Rightarrow E^{(2)} = E_z^2 \cdot \left(C \cdot M_y^2 + C' J(J+1) \right)$$

максимальная поляризуемость — при $M_y = \pm J$

? в длинном периоде таб. Менделеева:

$4s^1\ 4d^5$, а не $4s^2\ 4d^4$

Метод Хартри-Фока

Метод Хартри:

надо искать безусловный экстремум функционала:

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle - \lambda \left(\langle \Psi | \Psi \rangle - 1 \right)$$

в методе Хартри ограничивают класс функций:

$$\Psi(x_1, \ldots, x_N) = \Psi_1(x_1) \ldots \Psi_N(x_N)$$

для тождеств. ч-ц надо симметризовывать или антисимметризовывать

Применим для 2х частиц.

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V_1(x_1) + V_2(x_2) + W(x_1, x_2)$$

ищем в виде

$$|\Psi\rangle = \Psi_1(x_1) \cdot \Psi_2(x_2)$$

$$\left\{ \langle \Psi | H | \Psi \rangle - \lambda \left(\langle \Psi | \Psi \rangle - 1 \right) \right\}$$

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \{ \} = 0 \Rightarrow \langle \Psi | \Psi \rangle = 1$$

$$\int dx_1 dx_2 |\Psi_1(x_1)|^2 \cdot |\Psi_2(x_2)|^2 = 1$$

никуда не следует, но удобно предположить, что

$$1 = \int dx_1 |\Psi_1(x_1)|^2 = \int dx_2 |\Psi_2(x_2)|^2$$

$$\frac{\delta}{\delta \psi_1^*(x_1)}\{\ \}$$

$$\frac{\delta}{\delta \psi_2^*(x_2)}\{\ \}$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 + V_1(x_1)\right)\psi_1(x_1) + \int dx_2 |\psi_2(x)|^2 +$$

$$+ \psi_1(x_1)\cdot\left[\int dx_2\, \psi_2^*(x_2)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2 + V_2(x_2)\right]\psi_2(x_2)\right] + \psi_1(x)\cdot$$

$$\cdot \underbrace{\int dx_2\, \psi_1^*(x_1)\, W(x_1,x_2)\,\psi_2(x_2)}_{W_1(x_1)} +$$

$$+\lambda\psi_1(x_1)\underbrace{\int dx_2\, |\psi_2(x_2)|^2}_{1} = 0$$

$$\begin{cases}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 + V_1(x_1) + W_1(x_1)\right]\psi_1 = \\ \qquad = (\lambda - E_2)\,\psi_1 \\ \left[\,1 \leftrightarrow 2\,\right]\end{cases}$$

метод Хартри - Фока

ищем ПАС ВФ с учетом спина

$$\Psi(x_1,x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle \pm |\downarrow\uparrow\rangle\right).$$

$$\cdot\ \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_1(x_1)\psi_2(x_2) \mp \psi_2(x_1)\psi_1(x_2)\right)$$

потребуем, чтобы

$$\int \psi_1^*(x)\cdot\psi_2(x)\,dx = 0$$

иначе ПАС не имеет смысла

$$\int |\psi_1(x)|^2 dx = \int |\psi_2(x)|^2 dx = 1$$

$\langle\psi|H|\psi\rangle$; для тождеств. ч-ц:

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + V(x_1) + V(x_2) + W(x_1,x_2)$$

$$\langle\psi|H|\psi\rangle = \int dx_1 dx_2\, \psi_1^*(x_1)\psi_2^*(x_2)\cdot$$

$$\cdot\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2 + V(x_1) + V(x_2) + W(x_1,x_2)\right)\left[\psi_1(x_1)\psi_2(x_2) \mp \psi_1(x_2)\psi_2(x_1)\right]$$

$$\int dx_2\, \underbrace{\psi_2^*(x_2)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2 + V(x_2)\right]\psi_1(x_2)}_{E_{21}}\cdot\psi_2(x_1)$$

$$\psi_2(x_1)\underbrace{\int dx_2\, \psi_2^*(x_2)\, W(x_1,x_2)\,\psi_1(x_2)}_{W_{21}(x_1)}$$

$$\int dx_2\, \psi_2^*(x_2)\psi_1(x_2)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 + V(x_1)\right)\psi_2(x_1) =$$

$$\langle\psi|H|\psi\rangle = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 + V(x_1) + W_1(x_1)\right]\psi_1(x_1) \mp$$

$$\mp\left[E_{21} + W_{21}(x_1)\right]\psi_2(x_1) =$$

$$= (\underbrace{\lambda}_{E} - E_2)\,\psi_1(x_1)$$

E полн. эн. системы

21.10.04

Лекция 32

Типы химической связи

а) ионная $Na^+ \; Cl^-$

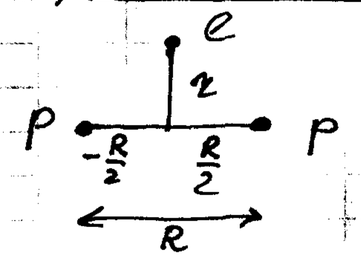
$+5{,}1$ эВ $\quad 2{,}5$ Å $\quad -3{,}7$ эВ – эн. связи

$-5{,}6$ эВ – кулоновская энергия

$-4{,}2$ эВ

вопрос: почему $2{,}5$ Å ?

б) ковалентная



R – фиксировано

Ищем min эффект. пот-ла системы

Это 2-мерная задача. ВФ ищем либо в четном, либо в нечет. виде.

$$E_0(R) = V_{eff}(R)$$

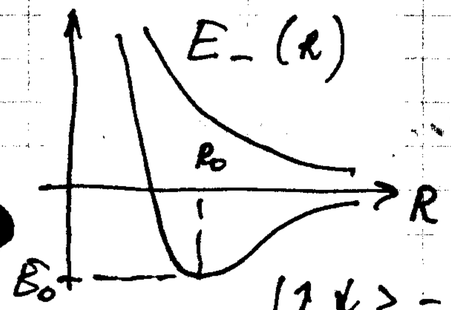
$$\Psi_+ = N_+ \Big(\underbrace{\psi_{100}\left(\frac{\vec R}{2} + \vec r\right)}_{\text{ВФ левого ядра}} + \underbrace{\psi_{100}\left(\vec r - \frac{\vec R}{2}\right)}_{\text{ВФ правого ядра}} \Big)$$

$$\Psi_- = N_- \left(\psi_{100}\left(\vec r + \frac{\vec R}{2}\right) - \psi_{100}\left(\vec r - \frac{\vec R}{2}\right) \right)$$

Если бы $R \to \infty$, то $N_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}$

$$H = \frac{e^2}{R} - \frac{e^2}{\left|\vec r + \frac{\vec R}{2}\right|} - \frac{e^2}{\left|\vec r - \frac{\vec R}{2}\right|} + \frac{p^2}{2m_e}$$

$$E_\pm(R) \equiv \langle \Psi_\pm | H | \Psi_\pm \rangle = V_\pm^{eff}$$



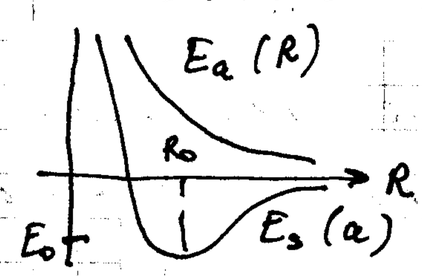
$R_0 = 1{,}3$ Å $\quad 1{,}1$ Å

$E_0 = -1{,}8$ эВ $\quad -2{,}8$ эВ

на самом деле $\quad$ посчитано

$$\Psi_S = \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \Big| \psi_{100}\left(\vec r_1 - \frac{\vec R}{2}\right) \psi_{100}\left(\vec r_2 + \frac{\vec R}{2}\right) + \psi_{100}\left(\vec r_2 - \frac{\vec R}{2}\right) \psi_{100}\left(\vec r_1 + \frac{\vec R}{2}\right)$$

$$\langle \Psi_S | H | \Psi_S \rangle = E_S(R)$$



$R_0 = 0{,}8$ Å $\quad 0{,}7$ Å

$E_0 = -3{,}2$ эВ $\quad -4{,}7$ эВ

Классификация и структура термов 2-хатомных молекул

$L_z = \Lambda$ $\quad$ Термы $\quad \Sigma$, Π, Δ, ...

терм $^{2S+1}\Lambda$

$\Sigma_{u \text{ или } g}$ (u – нечет, g – чет.)

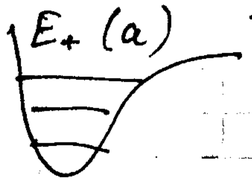
Осн. терм $^1\Sigma_g^+$ (макс. симметрия)

$\exists$ исключения $\quad NO \quad {}^2\Pi$

$O_2 \quad {}^3\Sigma_g^-$

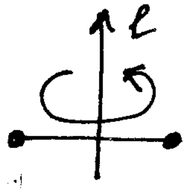
Структура термов

- **Колебательная структура:**



$\sim 0{,}5$ эВ

- **Вращательные уровни**



$\sim 10^{-3}$ эВ

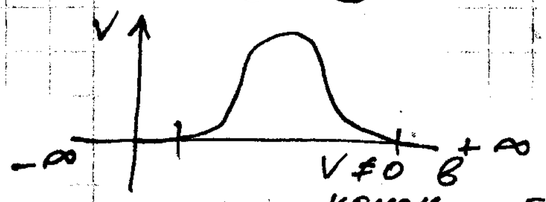
- **Релятивистские поправки**

когда $S \neq 0$, связанные с lS взаимодействием

Теория рассеяния

1) Постановка задачи

Стац. УШ: $\psi'' + \Big(\underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}E}_{k^2} - \frac{2m}{\hbar^2}V\Big)\psi = 0$



Ищем решения, отвечающие непр. спектру

$$\psi(x)\Big|_{x\to-\infty} = e^{ikx} + Ae^{-ikx}$$

$$\psi(x)\Big|_{x\to+\infty} = Be^{ikx}$$

к-т прохождения $T = |B|^2$

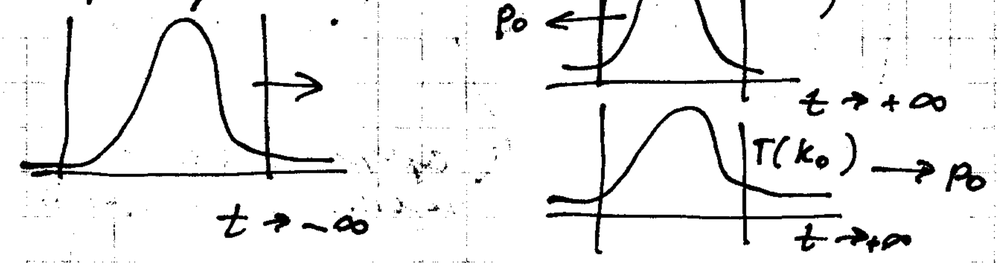
к-т отражения $R = |A|^2$

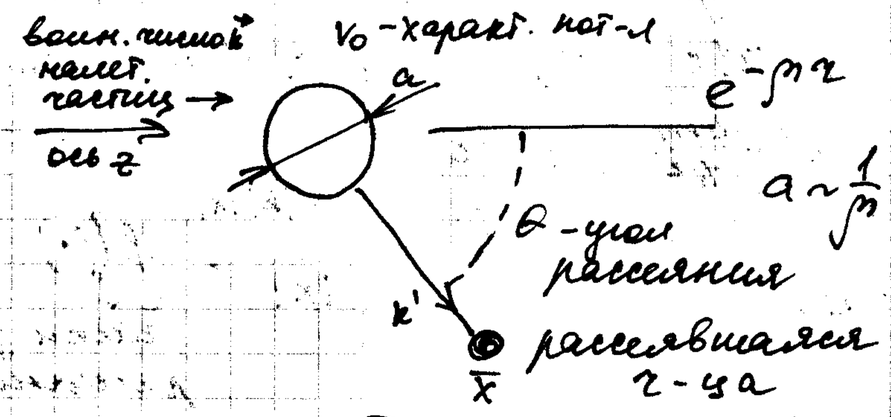
j - поток вер-ти

$T = \frac{j \text{ проходящ.}}{j \text{ налет}}$; $R = \frac{j \text{ отраж}}{j \text{ налет.}}$

$p_0 = \hbar k_0$

нормировка на 1





$k' \equiv |k| \cdot \frac{\bar{x}}{|\bar{x}|}$ (так его определим)

Нас интересует диф. сечение рассеяния $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ и полное сечение σ

Утв. Задача рассеяния решается, если $\int d\bar{x} \cdot V^2(\bar{x}) < \infty$

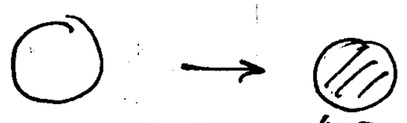
Кулоновский пот-л не удовл. этому требованию.

Пот-л $\frac{e^{-\varepsilon|x|}}{|x|}$ (Юкавы) удовлетворяет

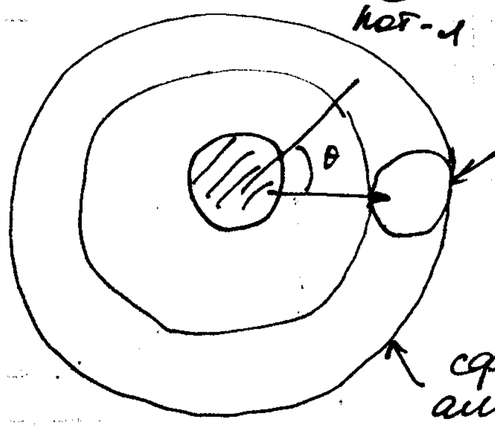
Лекция 33

28.10.04

1) налет. волн. пакет



2)



Случай непр. спектра

Если $\int V^2 dx < \infty$, то $\exists$ собст. $\in$ непр. спектру

$$\Delta\psi + \left(k^2 - \frac{2m}{\hbar^2}V\right)\psi = 0$$

$$\psi(x)\Big|_{|\bar{x}|\to\infty} = e^{+i\bar{k}\bar{x}} + \frac{e^{i|k||x|}}{|x|}\underbrace{f(\theta)}_{\text{ампл-да рассеяния}}$$

Замечания

1) потенциальное рассеяние
2) упругое рассеяние

$$\frac{\frac{dj_{\text{налет}}}{d\Omega}}{j_{\text{налет}}} = \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$$

$\sigma_{tot} = \int |f(\theta)|^2 d\Omega$ - полное сеч. рас.

Ур-ие Липпмана - Швингера

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

(в нем заложено стац. ур-ие + верная асимптотика)

$(\Delta_x + k^2)G_0(\bar{x},\bar{y}) = \delta(\bar{x}-\bar{y})$ - ур-ие Гельмгольца

$$(\Delta + k^2)G_0(\bar{x},\bar{y}) = \delta(\bar{x}-\bar{y})$$

$$G_0(\bar{x},\bar{y}) = -\frac{1}{4\pi}\cdot\frac{e^{i|k|\cdot|\bar{x}-\bar{y}|}}{|\bar{x}-\bar{y}|}$$

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

$$\Delta e^{ik\bar{x}} = -k^2 e^{ik\bar{x}}$$

$$(\Delta + k^2)\psi(\bar{x}) = 0 + \int d\bar{y}\,\delta(\bar{x}-\bar{y})\cdot\frac{2m}{\hbar^2}V(\bar{y})\psi(\bar{y})$$

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

$\Rightarrow$ инт. ур-ие эквив стац. ур. Шр.

Замена

$$|\bar{x}-\bar{y}|\Big|_{\substack{|\bar{x}|\to\infty \\ |\bar{y}|\le a}} \cong |\bar{x}| - \bar{y}\frac{\bar{x}}{|\bar{x}|}$$

$$|\bar{k}|\,|\bar{x}-\bar{y}| \cong |\bar{k}||\bar{x}| - \underbrace{\left[|\bar{k}|\cdot\frac{\bar{x}}{|\bar{x}|}\right]}_{\bar{k}'}\bar{y} =$$

$$= |\bar{k}||\bar{x}| - \bar{k}'\bar{y}$$

$$G_0(\bar{x},\bar{y}) \to -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{i|k||x| - i\bar{k}'\bar{y}}}{|\bar{x}| - \bar{y}\frac{\bar{x}}{|\bar{x}|}}$$

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

$$\underbrace{\left[-\frac{1}{4\pi}\cdot\frac{2m}{\hbar^2}\cdot\int d\bar{y}\, e^{-i\bar{k}'\bar{y}}V(\bar{y})\psi(y)\right]}_{\text{амплитуда рассеяния}}$$

Борновский ряд

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

Ур-ие Липпмана-Швингера

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

$$\psi(\bar{z}) = e^{ik\bar{z}} + \int d\bar{w}\, G_0(z,w)V(w)\frac{2m}{\hbar^2}\cdots$$

$$\psi(\bar{x}) = \underbrace{e^{i\bar{k}\bar{x}}}_{\psi(0)} + \underbrace{\int d\bar{y}\, G_0(\bar{x},\bar{y})\frac{2m}{\hbar^2}V(y)\cdot e^{iky}}_{\psi^1} +$$

$$+\int d\bar{y}\, G_0(\bar{x},\bar{y})\frac{2m}{\hbar^2}V(y)\int d\bar{z}\, G(y,z)\frac{2m}{\hbar^2}\cdot V(z)\cdot$$

$$\cdot\psi(z) + \int dy\, G_0(x,y)V(y)\int dz\, G_0(y,z)V(z)\cdot\frac{2m}{\hbar^2}\cdot$$

$$\cdot\int dw\, G_0(z,w)V(w)\cdot\frac{2m}{\hbar^2}\psi\ldots$$

это назыв. Борновским рядом

Утв. Если потенциал сферич. симметричен, то если $\int_0^\infty r\,dr\,V(r) < \infty$, то борновский ряд сходится.

1 Борновское приближение:

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

амплитуда рассеяния

$$f^{(1)} = -\frac{1}{4\pi}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)\int d\bar{y}\, e^{-i\bar{k}'\bar{y}}\cdot V(\bar{y})\underbrace{e^{i\bar{k}\bar{y}}}_{\psi(\bar{y})\to\psi^{(0)}(\bar{y})}$$

$$\langle k'|V(\bar{y})|k\rangle$$

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

$$\int d\bar{x}\cdot e^{i\bar{q}\bar{x}}V(\bar{x})$$

Условия применимости

- $1 \gg \left|\int dy \underbrace{G_0(\bar{x},\bar{y})}_{\frac{e^{i|k||\bar{x}-\bar{y}|}}{|\bar{x}-\bar{y}|}}\frac{2m}{\hbar^2}\underbrace{V(\bar{y})}_{V_0}e^{i\bar{k}\bar{y}}\right|$

в среднем $\langle|\bar{x}-\bar{y}|\rangle = a$

$$1 \gg \left|\int d\bar{y}\,\frac{e^{i\bar{k}\bar{y}}}{a}\cdot\frac{2m}{\hbar^2}V_0\right|$$

$$\int_0^\infty\!\!\int\!\!\int dx\,dy\,dz\,\frac{e^{ikx}}{a}\cdot\frac{2m}{\hbar^2}V_0 =$$

$$= \left[\int dy\,dz = a^2\right] \Rightarrow 1 \gg \left|\frac{2m}{\hbar^2}V_0 a^2\frac{e^{ika}-1}{ika}\right|$$

$ka \ll 1$

$V_0 \ll \frac{\hbar^2}{2ma^2}$

$ka \gtrsim 1$

$V_0 \ll \frac{\hbar^2}{2ma^2} \cdot ka$

Парциальное разложение

V – сферич. симметричен

$[\bar{l}; \bar{H}] = 0$

Каждая волна рассеивается по отдельности

$$\psi(\bar{x}) = \sum_{lm} R_{lm}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

в силу аксиальной симметрии от φ зав-ти не будет

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) \sim P_l^{|m|}(\cos\theta) e^{im\varphi}$$

если нет зав-ти от φ, то разложение только по $P_l(\cos\theta)$

$$\psi(\bar{x}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta) \cdot u_l(r)$$

$$f(0) = \sum_l (2l+1) \cdot P_l(\cos\theta) f_l$$

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

$$j_l(\bar{r}) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{l+\frac{1}{2}}(z)$$

„маленькие" (шаровые) ф-ии Бесселя

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

$$R = \frac{1}{\sqrt{r}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) \cdot C + 0 = j_l(kr) \underbrace{C'}_{i^l}$$

$$P_l(\cos\theta = 0) = P_l(1) = 1$$

$$e^{i\bar{k}\bar{x}} = e^{ikr\cos\theta}$$

$\theta \equiv 0 \quad r \to 0$

$$P_l(\cos\theta = 0) = P_l(1) = 1$$

$$P_l(-1) = (-1)^l$$

$$j_l(r \to 0) \sim r^l$$

никакого карц ряда для диф сечения нет и быть не может.

$$\frac{d\sigma}{d\theta} = |f(\theta)|^2 = f^*(\theta) \cdot f(\theta) =$$

для данного 0, а не для набора всех θ

$$= \sum_l (2l+1) \cdot P_l(\cos\theta) f_l^* \cdot \sum_{l'} (2l'+1) \cdot P_{l'}(\cos\theta) \cdot f_{l'}$$

$$\sigma_{tot} = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = \int \sin\theta \, d\theta \underbrace{d\varphi}_{2\pi} |f(\theta)|^2$$

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

$$\sigma_{tot} = \sum_l (2l+1)(2l+1)\cdot 2\pi \cdot \frac{2}{2l+1} f_l^* f_l =$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} 4\pi(2l+1)|f_l|^2 = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l$$

Парциальное сечение рассеяния σ_l

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

$$u_l(r\to\infty) = A\frac{e^{ikr}}{r} + B\frac{e^{-ikr}}{r}$$

4.11.04 # Лекция 34

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

поток сквозь замкнутую сферу

$$j_\uparrow = 4\pi R^2 \underbrace{\frac{\hbar k}{m}}_{\text{скорость}} |A|^2 \frac{1}{R^2} = \underbrace{4\pi\frac{\hbar k}{m}}_{\text{нет зав-ти от } R,\ \text{что естественно}} |A|^2$$

поток наружу

$$j_\downarrow = -4\pi R^2 \frac{\hbar k}{m}|B|^2 \cdot \frac{1}{R^2}$$

поток внутрь

У нас стац. УШ $\Rightarrow$

$$j_\uparrow + j_\downarrow = 0 \Rightarrow |A| = |B|$$

Тогда асимптотика переписывается в виде:

$$u_l(r\to\infty) = \frac{D}{r}\cos(kr + \varphi)$$

веществ. фаза

нек. множитель, не имеющий никакого физ. смысла

Весь физ. смысл – в фазе φ

f_l – парциальная амп-да рассеяния

Решение ур-ия Липпмана-Швингера

$$\psi(x) = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)\varphi_l(r)$$

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

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

из ММФ: $j_l(r)\big|_{r\to\infty} = \sqrt{\frac{2}{\pi r}}\cdot\cos\left(r - \frac{\pi l}{2} - \frac{\pi}{4}\right)$

$$j_l(r)\big|_{r\to\infty} = \frac{1}{r}\cdot\cos\left(r - \frac{\pi}{2}(l+1)\right)$$

$$\psi(\bar{x})\big|_{|\bar{x}|\to\infty} = e^{ik\bar{x}} + \frac{e^{ikr}}{r}f(\theta)$$

Для каждого из слагаемых у нас есть парциальные ряды:

$$|\bar{x}| = r$$

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

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

3-н сохр. вер-ти $\Rightarrow$ $|A| = |B|$

$$A = \frac{1}{2k}e^{-\frac{\pi i}{2}} + f_l$$ – коэф. при расход. волне

$$B = \frac{1}{2k}e^{\frac{\pi i}{2}(2l+1)}$$ – коэф. при сходящ. сферич. волне

Тогда $\left|\frac{1}{2ik} + f_\ell\right| = \frac{1}{2k}$

Обозначим

$$\frac{1}{2ik} + f_\ell = \frac{1}{2ki} e^{2i\delta_\ell} = \frac{1}{k} \sin\delta_\ell \cdot e^{i\delta_\ell}$$

↑ просто фаза

$$\boxed{f_\ell = \frac{1}{2ik}\left(e^{2i\delta_\ell} - 1\right)}$$

$$\mathrm{Im} f_\ell = \sin\delta_\ell \cdot \frac{\sin\delta_\ell}{k}$$

$$|f_\ell|^2 = \frac{\sin^2\delta_\ell}{k^2}$$

Закон сохр. вер-ти $\Leftrightarrow$ $f_\ell = \frac{1}{2ik}\left(e^{2i\delta_\ell} - 1\right) \Leftrightarrow$

$\Leftrightarrow |f_\ell|^2 = \frac{1}{k}\mathrm{Im} f_\ell$ (условие унитарности для парц. амплит-ф рассеяния)

Если гам-н эрмитов, то условие унитарности выполнено.

$$u_\ell(r \to \infty) = \frac{e^{2i\delta_\ell}}{i} \cdot \frac{1}{2k} \cdot \frac{e^{ikr}}{r} +$$

$$+ \frac{1}{2k} e^{\pi i \frac{(2\ell+1)}{2}} \cdot \frac{e^{-ikr}}{r} = e^{\frac{\pi i \ell}{2}} \cdot e^{i\delta_\ell} \cdot$$

$$\cdot \frac{1}{kr} \cdot \frac{1}{2}\left[\exp\left\{ikr - \frac{\pi i(\ell+1)}{2} + i\delta_\ell\right\} + \right.$$

$$\left. + \exp\left\{-ikr + \frac{\pi i(\ell+1)}{2} - i\delta_\ell\right\}\right) =$$

$$= e^{\frac{\pi i \ell}{2}} e^{i\delta_\ell} \cdot \frac{1}{kr} \cdot \cos\{\} = i^\ell \cdot e^{i\delta_\ell} \frac{1}{kr} \cdot$$

$$\cdot \cos\left(kr + \frac{\pi(\ell+1)}{2} + \delta_\ell\right) \sim \cos(kr + \varphi)$$

асимпт. у ш

$$\delta_\ell = \varphi + \frac{\pi(\ell+1)}{2}$$

Т. о. мы нашли фазу рассеяния $\Rightarrow$ можем найти парц. ампл-ду рас.

Оптическая теорема и её физ. смысл.

$$\sigma_{tot} = \sum_{\ell=0}^{\infty} 4\pi(2\ell+1)|f_\ell|^2 =$$

$$= \sum_{\ell=0}^{\infty} 4\pi(2\ell+1) \cdot \frac{1}{k}\mathrm{Im} f_\ell =$$

$$= \frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1) f_\ell = \frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1) f_\ell \cdot \frac{1}{P_\ell(1)} \cdot P_\ell(\cos 0)$$

$$= \frac{4\pi}{k}\mathrm{Im} f(\theta)\Big|_{\theta=0}$$

↑ ампл. рассеяния вперед

$$\boxed{\sigma_{tot} = \frac{4\pi}{k}\mathrm{Im} f(\theta)\Big|_{\theta=0}}$$ — опт. теорема

физ. смысл - з-н сохр. числа частиц при рассеянии. Опт. т-ма верна не только для сферич. пот-ла.

Метастабильные уровни.

Радиальное уравнение

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

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2$$

$$k = k_0 + ik_1$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}(k_0^2 + k_1^2 \pm 2ik_0k_1) = E_0 \pm iE_1$$

k направлен вдоль вектора оси

$$A\frac{e^{ikr}}{r} + B\frac{e^{-ikr}}{r}$$

$$\downarrow \qquad \downarrow$$

$$|A|e^{i\alpha} \qquad |B|e^{i\beta}$$

$$\alpha - \beta \equiv 2\varphi = 2\left(\delta_\ell - \frac{\pi(\ell+1)}{2}\right)$$

$$\alpha = \delta + \varphi$$

$$\beta = \delta - \varphi \qquad (\delta - \text{фаза константы})$$

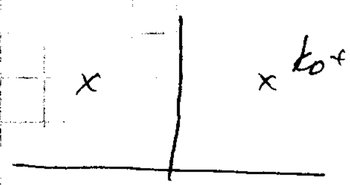
Перейдем к комплексной плоскости

ищем корни $B(k_0 \pm ik_1)$

$$B(k_0 \pm ik_1) \equiv 0$$

1) при вещ. k корней нет, т.е. в этом случае $|A| = |B| = 0$

2) в верх. полуплоскости корней нет.



Предположим противное.

Тогда

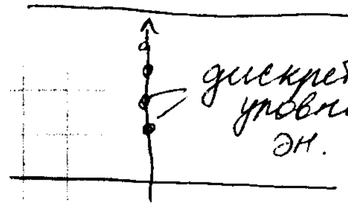
$$\psi_\ell(r)\Big|_{r\to\infty} = \frac{Ae^{ikr}}{r}e^{-k_1 r} \to$$

это квадратично интегрируемая ВФ $\Rightarrow$ $\Rightarrow$ дискретный уровень.

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}(k_0^2 - k_1^2 + 2ik_0k_1), \text{ но } E - \text{СЗ}$$

оператора $\hat{H}$, k-бий явл. эрмитовым $\Rightarrow$ у него не м.б. комплексных СЗ. $\to$ противоречие.

Исключения



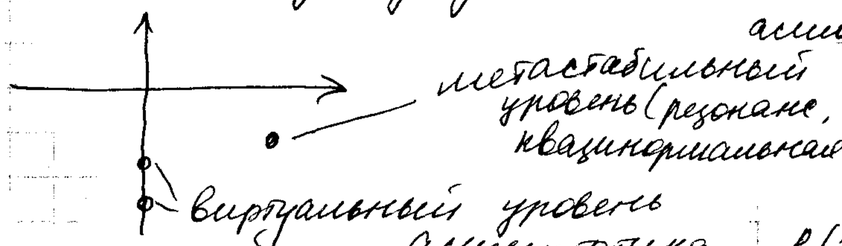
$$k_0^2 + 2ik_0k_1 = 0$$

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m}k_1^2$$

асимптотика ВФ

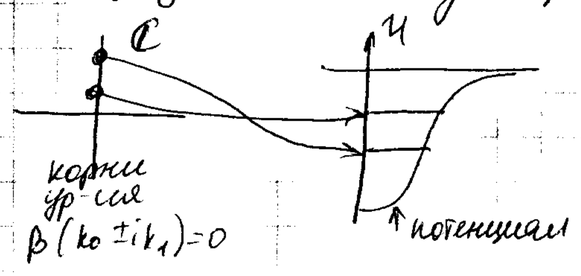
$$R(r) \sim \frac{e^{-k_1 r}}{r}$$

В нижней полуплоскости корни лежат где угодно.



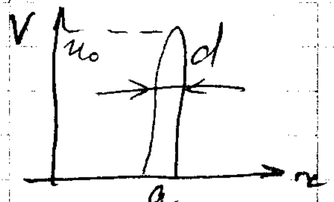
Комментарии

Физ. смысл дискрет. <u>вирт.</u> уровней уменьшение и сужение потенц. ямы $\Rightarrow$ уровни поднимутся вверх, на $\mathbf{C}$ точки окунутся вниз



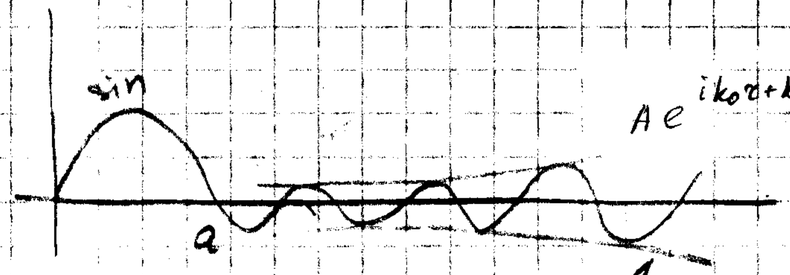
Можно добиться того, что останется только 1 уровень. Это соответствует перепрыгиванию корня из верхней полуплоскости в нижнюю, т.е. уровень станет виртуальным.

Метастабильный уровень



но достаточно велико

В этом пот-ле 3 уровня, ВФ к-ых имеет вид:

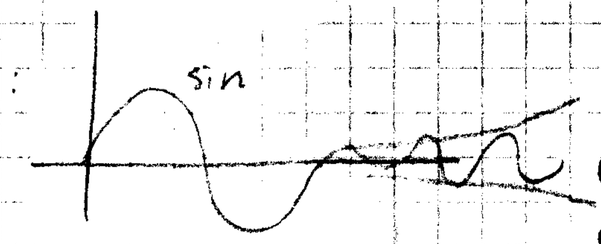


$Ae^{ik_0r+k_1r}$ (мы построили мнимую часть)

амплитуда sin растет

$k_0 = \frac{\pi}{a}$

След. реш. УШ:



$k_0 = \frac{2\pi}{a}$

$k_1 \sim k_0^2$

заметим, что длина волны не изменяется

Физ. смысл у растущих на ∞ exp есть!

$\psi(x) \to e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi(x)$

реш. стац. ур.

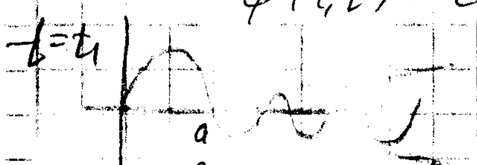
$\psi(r,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_0t - \frac{1}{\hbar}E_1t}\psi(r)$ — решение нестац. УШ

веществ. часть энергии

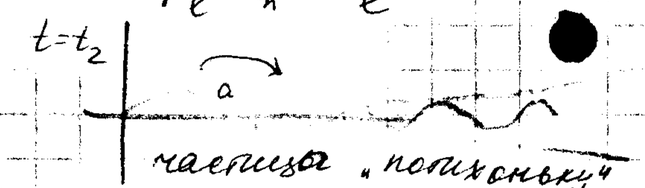
мнимая часть энергии.

Подставляем асимптотику

$$\psi(r,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_0t + ik_0r}\cdot e^{-\frac{E_1}{\hbar}t}e^{k_1r}$$



ч-цы в осн. сост. в оболочке радиуса a

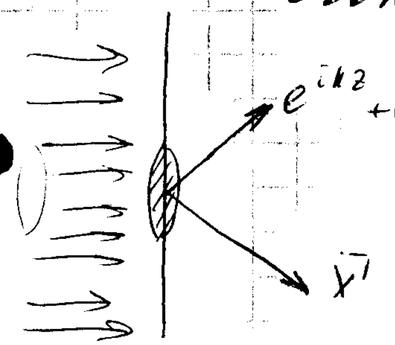


частица „потихоньку" убегает через барьер. Этому соответствует $e^{-\frac{E_1}{\hbar}t}$ — она улетает на ∞ — объяснение плоской волны, улетающей на ∞

Замечание: это не описывает реальный процесс

Лекция 36

11.11.04



$$\psi(\bar{x}') = \int d\bar{S}\left[\psi(\bar{x})\bar{\nabla}\bar{G}_0(\bar{x},\bar{x}') - \bar{G}_0(\bar{x},\bar{x}')\bar{\nabla}\psi(\bar{x})\right]$$

1) $\Delta = \bar{\nabla}^2$

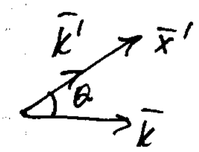
2) $\int_V d\bar{x}\, u\Delta w = \int_V dx\, w\Delta u + \int_S d\bar{S}\,(u\bar{\nabla}w - w\bar{\nabla}u)$

3) $(\Delta + k^2)\psi(x) \equiv 0$

4) $\psi(\bar{x}') = \int d\bar{x}\,\delta(x-x')\psi(\bar{x}) = \int d\bar{x}\,(\Delta+k^2)\cdot G_0(\bar{x},\bar{x}')\psi(\bar{x})$

$\psi(\bar{x}')\big|_{|\bar{x}'|\equiv r'\to\infty}$

$$G_0(\bar{x},\bar{x}')\big|_{|\bar{x}|\to\infty} = \frac{e^{ikr'}}{r'}\left[-\frac{1}{4\pi}e^{-i\bar{k}'\bar{x}}\right]$$



$d\bar{S} \to \rho\, d\rho\, d\varphi$ (φ отсчит. от $\bar{k}'$)

$\bar{\nabla} \to -\frac{\partial}{\partial z}$

$\bar{k}' = (k\sin\theta, 0, k\cos\theta)$

$\bar{x} = (\rho\cos\varphi, \rho\sin\varphi, z)$

$$\psi(\bar{x}')\big|_{|\bar{x}'|=r'\to\infty} = \frac{\exp(ikr')}{r'}\left(-\frac{1}{4\pi}\right)\int\rho\, d\rho\, d\varphi\cdot$$

$$\cdot\left(e^{2i\delta(\rho)}-1\right)\cdot ik(\underset{\psi}{1}+\underset{G_0}{\cos\theta})\cdot e^{i\phi}e^{-ik\rho\sin\theta\cos\varphi}$$

$$\int_0^{2\pi} e^{\pm ib\cos\varphi} = 2\pi J_0(b)$$

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

$$f(\theta) = \int_0^{+\infty} k^2 \rho\, d\rho \left[\frac{1}{2ik}\left(e^{2i\delta(\rho)} - 1\right)(1+\cos\theta)\cdot J_0(k\rho\sin\theta)\right.$$

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

$\vec{p} = \hbar\vec{k}$

ρ

$$l = \frac{p\rho}{\hbar} = k\rho$$

$$\delta(\rho) = \delta_{l \equiv k\rho} \qquad (1+\cos\theta) \simeq 2$$

$$J_0(k\rho\sin\theta) = J_0(\underbrace{l}_{\gg 1}\sin\overset{\nearrow 0}{\theta}) = P_l(\cos\theta)$$

$$f(\theta) = \int_0^{+\infty} l\,dl \underbrace{\left[\frac{1}{2ik}\left(e^{2i\delta_l} - 1\right)\right]}_{f_l} \cdot 2 \cdot P_l(\cos\theta) \simeq$$

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

Рассеяние тождественных частиц

$\psi(\bar{x}, \bar{y})$ $\qquad$ $V(x)$

$$V(\bar{x}; \bar{y}) = V(\bar{x} - \bar{y})$$

$m_1 = m_2$

$$\psi\left(\frac{\bar{x}+\bar{y}}{2}; \bar{x}-\bar{y}\right) = \underbrace{e^{ik\frac{\bar{x}+\bar{y}}{2}}}_{=0 \text{ в системе центра масс}} \chi(\underbrace{\bar{x}-\bar{y}}_{\bar{r}})$$

центр масс

$$\chi(\bar{r}) = e^{i\bar{k}\bar{r}} + \frac{e^{i|\bar{k}||\bar{r}|}}{|\bar{r}|} f_v(\theta)$$

θ

θ

$$\psi(x, y) = \psi(y, x) \text{ — бозоны}$$

$$\chi(\bar{x}-\bar{y}) = \chi(\bar{r}) = \chi(-\bar{r})$$

$$\chi(\bar{r}) = e^{i\bar{k}\bar{r}} + e^{-i\bar{k}\bar{r}} + \frac{e^{ik\bar{r}}}{r}\left[f(\theta) + f(\tilde{\theta})\right]$$

$\bar{r}$ $\qquad$ $-\bar{r} \Leftrightarrow \pi - \theta$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_v(\theta) + f_v(\pi-\theta)|^2$$

Фермионы

1) синглет

$$\frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{2}\psi_1(x, y)$$

$$s = 0 \Rightarrow |f(\theta) + f(\pi-\theta)|^2$$

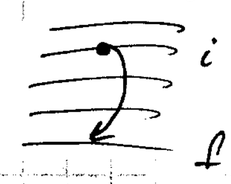
2) триплет

$$\psi_3(\bar{x}, \bar{y}) = -\psi_3(y, x)$$

$$\left.\begin{array}{l} |\uparrow\uparrow\rangle \\ |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{array}\right\} \psi_3(\bar{x}, \bar{y}) \qquad s = 1 \Rightarrow |f(\theta) - f(\pi-\theta)|^2$$

Нестационарная теория возмущений. Представление Дирака. Теория переходов

$$H = H_0 + H_I(t) \quad ; \quad H_0 \to \{E_i; \psi_i\}$$



i

f

нас интересуют

P_{if} — ? $\qquad$ W_{if} — ?

$$W_{if} = \frac{dP_{if}}{dt} \text{ (скорость переходов)}$$

Представление Дирака

Предст. Гейзенберга $\quad |\psi_\Gamma(t)\rangle = |\psi_\Gamma(0)\rangle$

$$\frac{d}{dt}A_\Gamma(t) = \frac{i}{\hbar}\left[H; A_\Gamma(t)\right]$$

матрица плотности

Предст. Шредингера $\quad A_ш(t) = A_ш(0)$

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi_ш(t)\rangle = H|\psi_ш(0)\rangle$$

$$|\psi_ш(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\psi_ш(0)\rangle$$

$$A_\Gamma(t) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht} A_\Gamma(0)\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$$

$A_Г(0) = A_Ш(0)$

$|\psi_Г(0)\rangle = |\psi_Ш(0)\rangle \qquad U = \frac{i}{\hbar} H t$

$|\psi_Г(0)\rangle = |\psi_Ш(0)\rangle$

$H = H_0 + H_I(t) \qquad U = \exp\{\frac{i}{\hbar} H_0 t\}$

$A_Д(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} A_Ш(0) e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t}$

$\frac{d}{dt} A_Д(t) = \frac{i}{\hbar} [H_0 ; A_Д(t)]$

$|\psi_Д(t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} |\psi_Ш(t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} H t} |\psi_Ш(0)\rangle$

$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_Д(t)\rangle = \left[e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} \left(\left(i\hbar \frac{i}{\hbar} \right) (-H) \right) e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \cdot |\psi_Ш(0)\rangle \right.$

$= e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} [-H_0 + H] e^{-\frac{i}{\hbar} H t} |\psi_Ш(0)\rangle =$

$= e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} H_I e^{-i/\hbar \cdot H_0 t} e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \cdot |\psi_Ш(0)\rangle =$

$= \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} \cdot H_I e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t}}_{H_{IД}(t)} \cdot \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar} H_I t} |\psi_Ш(0)\rangle}_{|\psi_Д(t)\rangle} =$

$= H_{IД}(t) |\psi_Д(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_Д(t)\rangle$

H_0

E_1, ψ_1

E_2, ψ_2

E_3, ψ_3

$\vdots$

$|\psi_Д(t)\rangle = \sum_m C_m(t) |\psi_m\rangle$

$\sum_m i\hbar \dot{C}_m(t) |\psi_m\rangle =$

$= \sum_m C_m H_{IД}(t) |\psi_m\rangle$

Лекция 37

18.11.04

$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_Д(t)\rangle = H_{IД}(t) |\psi_Д(0)\rangle$

$H_0 |\psi_m\rangle = E_m |\psi_m\rangle$

$|\psi_Д(t)\rangle = \sum_m C_m(t) |\psi_m\rangle$ (разлож. по базису)

подставим разложение в ур-ие эволюции:

$\sum_m i\hbar \dot{C}_m |\psi_m\rangle = H_{IД}(t) \cdot \sum_m C_m |\psi_m\rangle$

умножим слева на $\langle\psi_n|$

$i\hbar \dot{C}_n(t) = \sum_m \langle\psi_n | H_{IД}(t) | \psi_m\rangle \cdot C_m$

$\langle\psi_n | H_{IД}(t) | \psi_m\rangle = \langle\psi_n | \underbrace{e^{i\frac{H_0}{\hbar} t}}_{e^{i\frac{E_n}{\hbar} t}} H_{IШ}(t) \cdot$

$\cdot \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t}}_{e^{-i\frac{E_m}{\hbar} t}} |\psi_m\rangle$

обозначим $\langle\psi_n | H_{IШ}(t) | \psi_m\rangle = H_{nm}(t)$

$e^{+\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)t} = e^{i\omega_{mn} t}$

окончательно:

$i\hbar \dot{C}_n(t) = \sum_m e^{i\omega_{nm} t} H_{nm}(t) C_m$

ВФ нам не нужна, т.к.

$|\psi_Д(t)\rangle = \sum_n C_n(t) |\psi_n\rangle$

вер-ть пребыв. на n-ом уровне в момент времени t равна $P_n(t) = |C_n(t)|^2$, а нам именно она и нужна

Точно задача нахождения коэф-ов не решается

$$C_n(t) = C_n^{(0)}(t) + C_n^{(1)}(t) + \dots$$

↑ формально

дальше 1 порядка не пойдём

$$C_n^{(0)} = \begin{cases} 1, & i = n \\ 0, & n \neq i \end{cases}$$

↑ нач. условия

сначала „сидели" на i-ом уровне с E_i и ψ_i

$$i\hbar \dot{C}^{(0)} + i\hbar \dot{C}_n^{(1)} =$$

0, т.к. $C^{(0)} = const$

$$= \sum_n e^{i\omega_{nm} t} H_{nm}(t) \left[C_m^{(0)}(t) + C_m^{(1)}(t) + \dots \right]$$

↑ это уже 2-ой порядок

$$= e^{i\omega_{ni} t} H_{ni}(t) \cdot 1 + 0$$

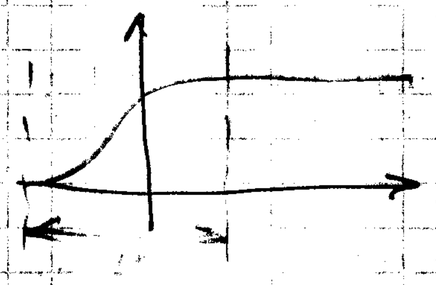
$$\boxed{i\hbar \dot{C}_f = e^{i\omega_{fi} t} H_{fi}(t)}$$

$C_i^{(\infty)} = 1$

если считать, что нач. момент это $t \to -\infty$, тогда

$$C_f^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{t} e^{i\omega_{fi} t} H_{fi}(t)\, dt$$

Адиабатический переход.



← приблизительно так ведут себя все матричные элементы $H_{I\text{Ш}}$

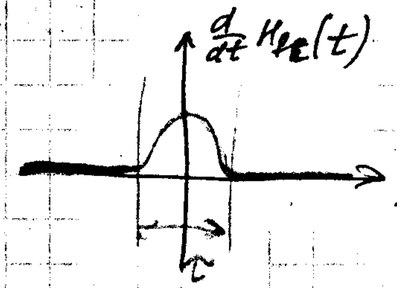
$$H_I = H_{I\text{Ш}}(t \to \infty)$$

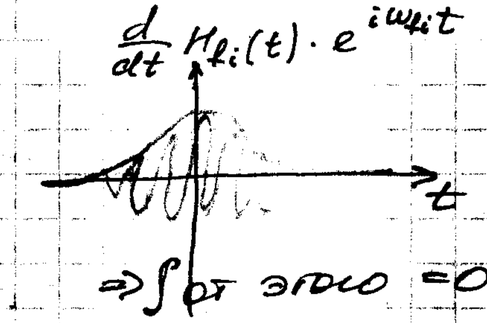
τ - время перехода

переход наз. адиабатическим, если $\tau \gg \frac{1}{\omega_{fi}} \; \forall f$, какие мы рассматриваем.

$$\int_{-\infty}^{t} dt\, \frac{1}{i\hbar} e^{i\omega_{fi} t} H_{fi}(t) = \text{по частям}$$

$$= \frac{H_{fi}(t)}{-\hbar\omega_{fi}} e^{i\omega_{fi} t} \Big|_{-\infty}^{t} - \int_{-\infty}^{t} dt\, \frac{1}{-\hbar\omega_{fi}} \left[\frac{dH_{fi}}{dt}\right] \cdot e^{i\omega_{fi} t}$$





$\Rightarrow \int$ от этого $= 0$

$$\Rightarrow C_f(t \to +\infty) = \frac{e^{i\omega_{fi} t}}{E_i - E_f} H_{fi}$$

↑ матрич. эл-т оконча. гам-на возмущения

$$|\psi_{Д}(t)\rangle\Big|_{t\to\infty} = |\psi_i\rangle + \sum_{f\neq i} \frac{H_{fi}}{E_i - E_f} e^{i\omega_{fi}t}|\psi_f\rangle$$

положим, что $H_{ii} = 0$, чтобы не было проблем со знаменателем

если $H_{ii} \neq 0$ сделать самим, нашёк:

$$1 + \frac{i}{\hbar} H_{ii} t \equiv e^{\frac{i}{\hbar} H_{ii} t} = e^{\frac{i}{\hbar} E_i^{(1)} t}$$

будет фазовый сдвиг

обозначим $|\psi_i\rangle = |\psi_i^{(0)}\rangle + |\psi_i^{(1)}\rangle$

$$|\tilde{\psi}_i\rangle = |\psi_i\rangle + |\psi_i^{(1)}\rangle$$

вспомним СТВ

$$H = H_0 + H_I$$

$$|\tilde{\psi}_i\rangle = |\psi_i\rangle + \sum_{f\neq i} \frac{\overbrace{\langle\psi_f|H_I|\psi_i\rangle}^{H_{fi}}}{E_i - E_f} |\psi_f\rangle$$

реш. СУШ

$$|\psi_{Ш}(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\tilde{E}_i t}|\tilde{\psi}_i\rangle$$

энергия i-го уровня с точностью до 1 порядка ТВ

$$\tilde{E}_i = \underset{\text{невозмущ.}}{E_i} + \overset{=0}{H_{ii}} = E_i$$

„волну" можно не ставить

$$|\psi_{Д}(t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}|\psi_{Ш}(t)\rangle =$$

$$= \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}}_{e^{\frac{i}{\hbar}E_i t}} \cdot \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}E_i t}}|\psi_i\rangle + \sum_{f\neq i} \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}}_{e^{\frac{i}{\hbar}E_f t}} e^{-\frac{i}{\hbar}E_i t} \cdot$$

$$\cdot |\psi_f\rangle \cdot \frac{H_{fi}}{E_i - E_f} =$$

$$= |\psi_i\rangle + \sum_f e^{i\omega_{fi}t} \frac{H_{fi}}{E_i - E_f}|\psi_f\rangle$$

Итак,

при $t \to -\infty$ H_0 • i-ый уровень

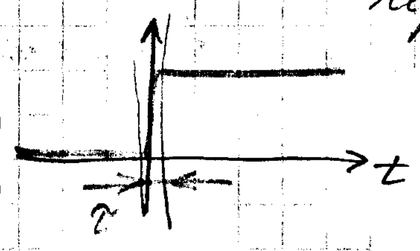
при $t \to +\infty$ $H_0 + H_I$ $\longrightarrow |\tilde{\psi}_i\rangle$

оказывается, если применить НТВ, то получится ВФ $|\psi_{Д}(t)\rangle$,

а если применить СТВ, построить $|\psi_{Ш}(t)\rangle$, а потом перейти в представл. Дирака, то получится то же самое.

т.о. система „подстроилась" под новый гамильтониан.

Мгновенные переходы



$\tau \ll \frac{1}{\omega_{fi}}$

у каждой реальной физ. сист. реализуются не все состояния

для тех сост., к-ые мы рассматриваем и к-ые реализуются, $\tau \ll \frac{1}{\omega_{fi}}$

рассматриваем переход как скачок ($\tau = 0$) при $t = 0$

при $t > 0$ $\hat{H} = \hat{H}_I$

тогда

$$c_f(t) = \int_0^t \frac{e^{i\omega_{fi}t}}{i\hbar} H_{fi}\, dt = \quad (H_{fi} \uparrow \text{не зав. от } t)$$

$$= \frac{\left(e^{i\omega_{fi}t} - 1\right) H_{fi}}{E_i - E_f}$$

при $t < 0$ $\quad |\psi_0(t)\rangle = |\psi_i\rangle$

при $t = +0$ (сразу после скачка)

$|\psi_0\rangle = |\psi_i\rangle$ (см. интеграл для $c_f(t)$)

пусть до скачка ВФ $|\psi_1\rangle$

сразу после $|\psi_2\rangle$

от того, что гам-н поменялся скачком, ВФ скачком не меняется, т.к. это соответствует δ-ф-ии в левой части НУШ, так что $|\psi_1\rangle = |\psi_2\rangle$ можно было сообразить, и не выписывая вид $c_f(t)$ (это — принцип Кондона)

$$|\psi_i\rangle = \sum c_f |\tilde{\psi}_f\rangle \quad (\text{для гам-на } H_0 + H_I)$$

тогда $|c_f|^2$ — искомые вер-ти

Будем рассуждать наоборот

$H_0 + H_I = \tilde{H}_0$ — невозмущ. гам-н,

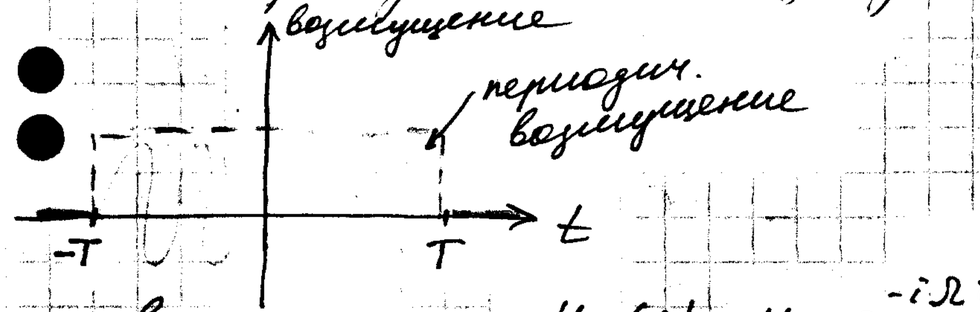
его ВФ $|\tilde{\psi}_f\rangle$, тогда

$|\psi_i\rangle$ — возмущ. ВФ для гам-на

$$\tilde{H}_0 + \tilde{H}_I = (\underbrace{H_0 + H_I}_{\tilde{H}_0}) + (\underbrace{-H_I}_{\tilde{H}_I})$$

тогда искомое разложение — СТВ с гам-ом возмущ. $(-H_I)$. ответ выписать самостоятельно.

Переходы под влиянием периодического возмущения



в книжках: $H_I(t) = \underbrace{H_I e^{-i\Omega t}}$

это та часть, к-ая дает ненулевой вклад

на самом деле надо писать:

$$H_I(t) = H_I e^{-i\Omega t} \cdot \frac{1}{2} + H_I^+ e^{i\Omega t} \cdot \frac{1}{2} =$$

$$= \left[\text{если } H_I \text{ - эрмитов}\right] = H_I \cdot \cos\Omega t =$$

$$= \left[\Omega \neq 0\right] = H_I \quad (\text{рассмотрим последний случай})$$

гам-н $\neq 0$ от $-T$ до T

$$c_f(t)\Big|_{t>T} = \int_{-T}^{T} dt \frac{1}{i\hbar} e^{i\omega_{fi}t} H_{fi} =$$

$$= \frac{1}{-i\hbar\omega_{fi}} \left(e^{i\omega_{fi}T} - e^{-i\omega_{fi}T}\right) \cdot H_{fi} =$$

$$= \frac{2i \sin\omega_{fi}T}{-i\hbar\omega_{fi}} H_{fi}$$

$$P_f = |C_f|^2 = \frac{4\sin^2(\omega_{fi}T)}{\hbar^2\omega_{fi}^2}\cdot|H_{fi}|^2$$

осциллирует

чему равна вер-ть перехода за $2T$?

$$W_{fi} = \frac{P_f}{2T}$$

скорость перехода

$$W_{fi} = \frac{4\sin^2(\omega_{fi}T)}{\hbar^2\omega_{fi}^2}|H_{fi}|^2\cdot\frac{1}{2T}\Big|_{T\to\infty} =$$

если $\omega_{fi} = 0$ (осц-ий нет)

$$= \frac{4\cancel{\omega_{fi}^2}T^{\cancel{2}}\cdot|H_{fi}|^2}{\hbar^2\cancel{\omega_{fi}^2}\cdot 2\cancel{T}} \to \infty$$

$$W_{fi} = \begin{cases} 0 & \omega_{fi}\neq 0 \\ \infty & \omega_{fi} = 0 \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin^2(\omega T)}{\omega^2 T}d\omega \overset{[\omega T = x]}{=} \int_{-\infty}^{\infty}dx\,\frac{\sin^2 x}{x^2} = \pi$$

$$\Rightarrow \frac{\sin^2(\omega T)}{\omega^2 T}\Big|_{T\to\infty} = \pi\cdot\delta(\omega)$$

Т.о.:

$$W_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar^2}\delta(\omega_{fi})\cdot|H_{fi}|^2$$

$$W = \sum_f W_{fi} = \frac{1}{\tau_i}$$

скорость убывания вер-ти пребывания в сост. i (она же скорость распада)

время жизни

Лекция 38

23.11.04

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x)$$

$$\delta(\omega_{fi}) = \delta\left(\frac{E_f - E_i}{\hbar}\right) = \hbar\delta(E_f - E_i)$$

$$H_{fi} = \langle\psi_f|H_I|\psi_i\rangle$$

$$\frac{1}{\tau_i} = \boxed{W_i = \frac{2\pi}{\hbar}\sum_f|\langle\psi_f|H_I|\psi_i\rangle|^2\delta(E_f - E_i)}$$

золотое правило Ферми

ф-ла для ск-ти перехода при период. возмущении в непр. спектре

если $H_I\cdot e^{\mp i\Omega t}$, то:

$$\frac{1}{\tau} = W_i = \frac{2\pi}{\hbar}\sum_f|\langle\psi_f|H_I|\psi_i\rangle|^2\delta(E_f - E_i \mp \hbar\Omega)$$

Замечание:

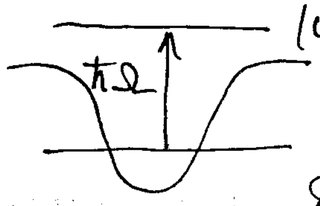
1) имеется в виду $H_I e^{i\Omega t} + H_I e^{-i\Omega t}$ но в каждой конкрет. задаче отлич. от нуля только один матр. эл-т

2) физ. смысла ф-ла не имеет

но $\sum_f \to \int df$ в случ. непр. спектра

$|\psi_i\rangle$ – всегда $\in$ непр. спектру

Мы будем рассм. переход $|\psi\rangle$ в $|\psi_f\rangle \in$ непр. спектру (НС)



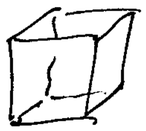
$|\psi_j\rangle$ (НС)

$|\psi_i\rangle$

ДС или НС (в зав-ти от задачи)

Иллюстрации

1) Упругое потенц. рассеяние (используем НТВ)



$L \to \infty$ $\quad H_0 = \frac{p^2}{2m}$

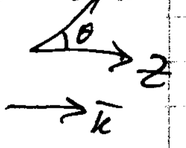
$$\psi(x,y,z) = \psi(x+L,y,z) = \psi(x,y+L,z) = \psi(x,y,z+L)$$

$$\psi_{\bar{k}}(\bar{x}) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\bar{k}\bar{x}}$$

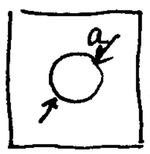
$$\bar{k} = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z)$$

т.о. построена замкн. область с перемен. ВФ, при $L \to \infty$ получ. ДС

Формулируем задачу: $|i\rangle = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\bar{k}\bar{x}}$



$$|\psi_f\rangle = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\bar{k}'\bar{x}}$$



$a \ll L$ $\quad H_I \equiv V(\bar{x})$ – гам-н возмущения

$$W_i = \sum_{k'} \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_f | H_I | \psi_i \rangle|^2 \cdot$$

$\cdot \delta\left(\frac{\hbar^2}{2m}(k')^2 - \frac{\hbar^2}{2m}k^2\right) \Rightarrow$ ЗСЭ соблюдается

т.е. – упругое рассеяние

$$\int dk' = \sum_{k'} \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2$$

$$\sum_{k'} \ldots \delta\left(\frac{\hbar^2}{2m}\bar{k}'^2 - \frac{\hbar^2}{2m}k^2\right) = \int dk' \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \cdot$$

$$\cdot \frac{2m}{\hbar^2}\delta(k'^2 - k^2) = \left[\begin{array}{c}\text{переходим в} \\ \text{сферич. ск}\end{array}\right] =$$

$$= \int d\Omega_{\bar{k}'} \, k'^2 dk' \ldots \cdot \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \cdot \frac{2m}{\hbar^2}\delta(k'^2 - k^2) =$$

$$= \int d\Omega_{\bar{k}'} \, k' \frac{d(k')^2}{2} \ldots \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \cdot \frac{2m}{\hbar^2} \cdot \delta(k'^2 - k^2) =$$

$$= \int d\Omega_{k'} \cdot k' \cdot \frac{1}{2} \cdot \ldots \cdot \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \cdot \frac{2m}{\hbar^2} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow W_i = \int d\Omega_{k'} \cdot \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \frac{k'^{\cancel{2}}}{2} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \cdot \frac{2m}{\hbar^2} \cdot$$

$$\cdot \left| \int dx \cdot \frac{e^{-i\bar{k}'\bar{x}}}{\sqrt{L^3}} \cdot V(\bar{x}) \cdot \frac{e^{i\bar{k}\bar{x}}}{\sqrt{L^3}} \right|^2$$

конечно $W \simeq 0$

$$\sigma_{tot} = \frac{W_i}{j}$$

↑ налетающий поток

раньше мы вычисляли $e^{i\bar{k}\bar{x}} \to \vec{j} = \frac{\hbar\bar{k}}{m}$

$$\frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\bar{k}\bar{x}} \to |j| = \frac{1}{L^3}\frac{\hbar k}{m}$$

$$\sigma_{tot} = \int d\Omega_{k'} \cdot \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \frac{k'}{2} \cdot \frac{1}{(2\pi)^3} \cdot \frac{1}{L^3} \cdot \frac{2m}{\hbar^2} \cdot \frac{m}{\hbar k} \cdot L^3 \cdot$$

$$\cdot \left| \int d\bar{x} \, e^{-i\bar{k}'\bar{x}} \cdot V(\bar{x}) \cdot e^{i\bar{k}\bar{x}} \right|^2 =$$

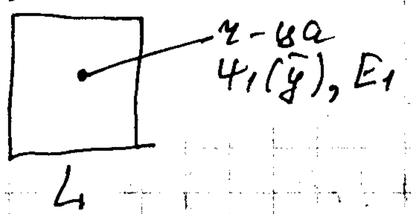
$$= \int d\Omega_k \cdot \frac{k'}{k} \cdot \frac{1}{(4\pi)^2} \cdot \frac{2m}{\hbar^2} \cdot \frac{2m}{\hbar^2} \; ?$$

$$\sigma_{tot} = \int d\Omega_{k'} \cdot \frac{k'}{k} \left| f^{(1)}(\theta) \right|^2$$

$$f^{(1)}(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \cdot \frac{2m}{\hbar^2} \int \underbrace{dx \cdot e^{-i\bar{k}'\bar{x}'} V(\bar{x}) e^{i\bar{k}\bar{x}}}_{\text{амплитуда рассеяния в борновском приближ.}}$$

т.е. 1 порядок НТВ приводит к 1 борновскому приближению.

2) Неупругое рассеяние



$\exists \psi_2(y), E_2$

одна ч-ца (2) налетает на другую (1)

$H_I = W(\bar{x}, \bar{y})$

$$|\psi_i\rangle = \frac{e^{ikx}}{\sqrt{L^3}} \psi_1(\bar{y})$$

$$|\psi_f\rangle = \frac{e^{ik'x}}{\sqrt{L^3}} \psi_2(\bar{y})$$

$E_i = E_1 + \frac{\hbar^2}{2m} k^2$, $E_f = E_2 + \frac{\hbar^2}{2m} k'^2$ $(|k| \neq |k|)$

Тогда после того, как мы „снимем" б-ф-ию, получим:

$$k' = \sqrt{k^2 + \frac{2m}{\hbar^2}(E_1 - E_2)}$$

Легко проверить, что $\sigma_{tot} = \int d\Omega_k \cdot \frac{k'}{k} |f^{(1)}(\theta)|^2$

$$f^{(1)}(\theta) = -\frac{1}{4\pi}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \cdot \int dx \cdot e^{-ik'\bar{x}} \cdot \int d\bar{y} \cdot$$

$$\cdot \psi_2^*(\bar{y}) \cdot W(\bar{x}, \bar{y}) \psi_1(\bar{y}) \cdot e^{ikx}$$

3)

$a \ll L$

$|\psi_i\rangle \equiv \psi_i(x)$

H_I - гам-н, к-рый нужен, чтобы сбив ч-цу с i-го состояния и заставить перейти к $k', |\psi_f\rangle$

$$H_I = V(x) \cdot \exp\{-i\Omega t\}$$

$$\frac{1}{\tau_i} = \int d\Omega_{k'} \cdot \frac{k'}{2} \cdot \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \cdot \frac{2m}{\hbar^2} \cdot \frac{2\pi}{\hbar} \cdot$$

$$\cdot \left| \int dx \cdot \frac{e^{-ik'\bar{x}}}{\sqrt{L^3}} V(\bar{x}) \cdot \psi_i(\bar{x}) \right|^2$$

$E_i = E_i$ $\qquad E_f = \frac{\hbar^2}{2m} k'^2$

$\delta(E_f - E_i - \hbar\Omega) \Rightarrow k' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_i + \hbar\Omega)}$

если $W_i = \int d\Omega_{k'} \cdot F(k')$

↑ то это вер-ть вылететь под соответствующим углом

$$\frac{dW_i}{d\Omega_{k'}} \equiv F(\vec{k}')$$

Вторичное квантование

1) Опис. процессы, где измен. число частиц

2) Состояния с неопред. числом ч-ц

Пусть $\exists$ какая-нибудь система. базис $|\psi_m\rangle$, стац. сост. E_m

a_m - оператор уничтожения

a_m^+ - оператор рождения $(= (a_m)^+)$

Постулируем:

Бозоны	Фермионы
$[a_n; a_m]_- = 0$	$[a_n; a_m]_+ = 0$
$[a_n; a_m^+]_- = \delta_{nm}$	$[a_n; a_m^+]_+ = \delta_{nm}$
$[a_n^+; a_m^+]_- = 0$	$[a_n^+; a_m^+]_+ = 0$

$[AB]_-$ – коммутатор, $[AB]_- = AB - BA$

$[AB]_+ = AB + BA$ – антикоммутатор $(= \{A; B\})$

$[\hat{x}; \hat{p}] = i\hbar$

$xp - px = 0 \simeq \hbar$

$[a_n; a_n^+] = 1$ $\quad a a^* - a^* a = 0 \simeq 1$

Фермионы

$[a_n; a_n^+]_+ = 1$

$a a^* + a^* a = 1 \approx 0$

$[a_n^+; a_m^+]_+ = a_n^+ a_m^+ + a_m^+ a_n^+ = 0$

$a_n^+ a_m^+ = -a_m^+ a_n^+$

$2(a_n^+)^2 = 0 = (a_n^+)^2$

Опр. Вак. состоянием или вакуумом называют в.ф.

$a_n |0\rangle = 0$ (не присут. ни одной τ-цы)

$\langle 0|0\rangle = 1$

$a_n^+ |0\rangle \equiv |4\rangle$

Легко проверить что $|4\rangle$:

$\langle 4|4\rangle = 1$

$|4\rangle$ – присут. ровно 1 τ-ца в n-ом состоянии

$a_m [a_n^+ |0\rangle] = (\delta_{nm} \underset{\text{бозоны}}{\mp}^{\text{фермионы}} a_n^+ a_m) |0\rangle =$

$= \delta_{nm} |0\rangle$

$a_n [a_n^+ |0\rangle] = |0\rangle$

$|0\rangle \underset{a_n}{\overset{a_n^+}{\rightleftarrows}} a_n^+|0\rangle$

$|x\rangle = \sum_n c_n a_n^+|0\rangle$ - одночастич. сост.

$\sum_n c_n|\psi_n\rangle = \sum_n c_n \psi_n(x)$

Сост. с неопред. числом ч-ц:

$\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} a_n^+|0\rangle$

2х частичное состояние м.б. построено след. образом:

$a_n^+ a_m^+|0\rangle = [\ ]$

$[\text{Ферм.}] = -a_m^+ a_n^+|0\rangle \Rightarrow$ ВФ ПАС

$a_n^+ a_n^+|0\rangle \equiv 0$

$[\text{Возд.}] = a_n^+ a_m^+|0\rangle = a_m^+ a_n^+|0\rangle$

$\frac{(a_n^+)^2}{\sqrt{2!}}|0\rangle$

$|\psi\rangle = a_n^+|0\rangle \qquad \langle\psi| = \langle 0|a_n$

$\langle\psi|\psi\rangle = \langle 0|a_n a_n^+|0\rangle = 1$

3х частичные состояния:

$a_n^+ a_m^+ a_e^+|0\rangle$

$\frac{(a_n^+)^3}{\sqrt{3!}}|0\rangle$

Опр. Построенное вышеуказ. способом пр-во (сост. из 0-част. 1-част. ...) называется фоковским пр-вом состояний

Фоковское пр-во разделяется на подпр-ва (базисы):

0 - част. сост. $|0\rangle$

1 - част. сост. $a_m^+|0\rangle$

2 - част. сост. $a_m^+ a_n^+|0\rangle$

...

По-другому можно записать базисный вектор след. образом:

$|\psi_{n_1,n_2,n_3,\dots}\rangle = \frac{(a_1^+)^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} \frac{(a_2^+)^{n_2}}{\sqrt{n_2!}} \dots |0\rangle$

Полное кол-во ч-ц в базисн. векторе $|\psi_{n_1,\dots}\rangle$:

$N = n_1 + n_2 + n_3 + \dots$

$N = 0 \rightarrow |0\rangle$

$N = 1 \rightarrow a_m^+|0\rangle$

Нормировка: $\langle\psi_{n_1,n_2\dots}|\psi_{n_1,n_2\dots}\rangle = 1$

$|\psi_{n_1,n_2,n_3\dots}\rangle \leftrightarrow \begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$ Представление чисел заполнения

Квант. числам и далее соответствовать наблюдаемые:

$n_i \leftrightarrow \hat{n}_i \equiv a_i^+ a_i$

(1) $[\hat{n}_i ; \hat{a}_j]_- = \delta_{ij}(-a_i)$

(2) $[\hat{n}_i ; \hat{a}_j^+]_- = \delta_{ij}(a_j^+)$

докажем (1):

$$[a_i^+ a_i, a_j] = a_i^+ a_i a_j - a_j a_i^+ a_i =$$

$$= a_i^+ a_i a_j + a_i^+ a_j a_i = a_i^+ a_i a_j - a_i^+ a_i a_j = 0$$

$$[a_i^+ a_i, a_i] = \underbrace{\cancel{a_i^+ a_i a_i}}_{0} - a_i a_i^+ a_i =$$

$$= -1 a_i + \underbrace{\cancel{a_i^+ a_i a_i}}_{0} = -a_i \quad (\text{ч.т.д.})$$

$$\hat{n}_i (a_i^+)^n |0\rangle = n (a_i^+)^n |0\rangle$$

$$\hat{N} \equiv \sum_i \hat{n}_i = \sum_i a_i^+ a_i$$

Оператор волновой функции (не эрмитов)

$$\hat{\psi}(x) \equiv \sum_m \hat{a}_m \psi_m(x)$$

$$\hat{\psi}^+(x) \equiv \sum_m \hat{a}_m^+ \psi_m^*(x)$$

$$\begin{matrix} X \\ P \end{matrix} \xrightarrow{\text{первичное квантование}} \begin{matrix} \hat{x} \\ \hat{p} \end{matrix} \quad \psi(x) \xrightarrow{\text{вторичное кв-ие}} \hat{\psi}(x)$$

$$|\chi\rangle = a_m^+ |0\rangle$$

$$\chi(x) = \frac{1}{\sqrt{1!}} \langle 0 | \hat{\psi}(x) | \chi \rangle \quad \left(\chi(x) \leftrightarrow |\chi\rangle \right)$$

$$\chi(x) = \frac{1}{\sqrt{1!}} \langle 0 | \hat{\psi}(x) | \chi \rangle =$$

$$= \langle 0 | \sum_n \psi_n(x) a_n a_m^+ | 0 \rangle =$$

$$= \langle 0 | \psi_m(x) | 0 \rangle = \psi_m(x) = \chi(x)$$

Двухчастичное состояние $|\chi\rangle$

$$\chi(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \langle 0 | \hat{\psi}(x) \hat{\psi}(y) | \chi \rangle$$

аналог-но: $\chi(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \langle 0 | \hat{\psi}(x) \hat{\psi}(y) \cdot \hat{\psi}(z) | \chi \rangle$

Фермионы: $|\chi\rangle = a_m^+ a_n^+ |0\rangle$

$$\chi(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \langle 0 | \sum_k \psi_k(x) \hat{a}_k \sum_l \psi_l(y) \hat{a}_l \cdot \hat{a}_m^+ \hat{a}_n^+ | 0 \rangle$$

$$\langle 0 | a_k a_l a_m^+ a_n^+ | 0 \rangle = \langle 0 | \underbrace{a_k \delta_{lm} a_n^+}_{\delta_{kn}} | 0 \rangle - \langle 0 | \underbrace{a_k a_m^+}_{\delta_{km}} \underbrace{a_l a_n^+}_{\delta_{ln}} | 0 \rangle =$$

$$= \delta_{lm} \delta_{kn} - \delta_{km} \delta_{ln} = \chi(x, y) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2!}} \left(\psi_n(x) \psi_m(y) - \psi_m(x) \psi_n(y) \right)$$

Опр.: 1) $\hat{V} = \int dx\, \hat{\psi}^+(x) V(x) \hat{\psi}(x) =$

$$= \int dx \sum_m \psi_m^* a_m^+ V(x) \sum_n \psi_n(x) a_n =$$

$$= \sum_{mn} V_{mn} a_m^+ a_n$$

$$V_{mn} \to \int dx\, \psi_m^*(x) V(x) \cdot \psi_n(x)$$

- $V(x) \equiv 1 \Rightarrow V_{mn} \equiv \delta_{mn}$

$$\left[1 \to \sum_m a_m^+ a_m = \sum_m \hat{n}_m = \hat{N} \right.$$ (для одной ч-цы $\hat{N} = \hat{1}$)

$\bullet V(x) = \hat{H}$ $\qquad \hat{H}\psi_m(x) = E_m \psi_m(x)$

$$H_{nm} = E_n \delta_{nm}$$

$$\hat{H} \to \sum_m E_m a_m^+ a_m = \sum_m E_m \hat{n}_m$$

$$|\chi\rangle = a_m^+ |0\rangle$$

$$|\xi\rangle = a_n^+ |0\rangle$$

$$\langle \xi_n | V | \chi_m \rangle = V_{nm} = \int dx\, \psi_n^* V(x) \psi_m$$

$$\langle 0 | a_n \sum_{kl} a_k^+ a_l V_{kl} a_m^+ |0\rangle \equiv V_{nm}$$

δ_{nk} $\qquad \delta_{lm}$

---

2) $W(x,y) \equiv W(x-y)$

$$\hat{W} = \frac{1}{2} \iint dx\, dy\, \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}^+(y) W(x,y) \hat{\psi}(y) \hat{\psi}(x) =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{klmn} a_k^+ a_l^+ a_m a_n W_{klmn}$$

Лекция

2.12.04

а) $N_V = \int_V dx\, \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}(x)$

$$\hat{N} = \int dx\, \psi^+(x) \hat{\psi}(x) = \sum_n a_n^+ a_n$$

б) $|\chi\rangle = \chi^+(x_0)|0\rangle = \sum_n \psi_n^*(x_0) a_n^+ |0\rangle$

$$\chi(x) = \frac{1}{\sqrt{1!}} \langle 0 | \hat{\psi}(x) | \chi \rangle =$$

$$= \langle 0 | \sum_m \psi_m(x) a_m \sum_n \psi_n^*(x_0) a_n^+ |0\rangle =$$

$$= \langle 0 | \sum_m \psi_m(x) \sum_n \psi_n^*(x_0) \delta_{nm} |0\rangle =$$

$$= \sum_n \chi_n(x) \cdot \psi_n^*(x_0) = \delta(x - x_0)$$

реально есть конечный размер пакета

$\hat{\psi}^+(x_0)$ – оп-р рождения 1 ч-цы, к-ая „сидит" в т. x_0

Квантование э/м поля

Излучение

Рассм. кубик с ребром L и периодич. гран. усл. для поля. В нем нет ни зарядов, ни токов

$$\begin{cases} div\,\vec{H} = 0 \\ div\,\vec{E} = 4\pi\rho = 0 \\ rot\,\vec{H} = \frac{4\pi}{c} j, \quad \frac{1}{c}\dot{E} = \frac{1}{c}\dot{E} \\ rot\,\vec{E} = -\frac{1}{c}\dot{H} \end{cases}$$

$$E = -\nabla\varphi - \frac{1}{c}\dot{A}$$

$$H = rot\,A$$

$$\varphi = 0 \qquad div\,\vec{A} = 0$$

$$-\Delta A = -\frac{1}{c^2}\ddot{A}$$

$$\vec{H} = rot\,\vec{A}$$

$$\vec{A}(\vec{x},t) = \sum_{\vec{k},\rho} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k\, s}} \cdot \bar{e}_{\bar{k}\rho} \cdot$$

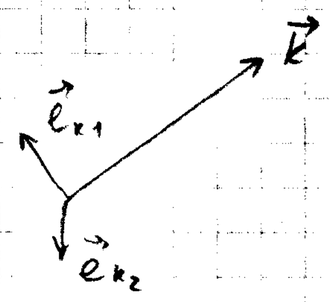
$$\cdot \left[e^{+i\bar{k}\bar{x} - i\omega_k t} \cdot a_{\bar{k}\rho} + e^{i\omega_k t - i\bar{k}\bar{x}}\, a^*_{\bar{k}\rho} \right]$$

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z)$$

$$\bar{e}_{\bar{k}\rho} \cdot \vec{k} = 0$$

$$\rho = 1, \quad \rho = 2$$

$$\omega_k = |\vec{k}|c$$



$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{8\pi}\int_{L^3} d\bar{x}\,(\vec{E}^2 + \vec{H}^2)$$

1) $\int dx \cdot e^{i\bar{k}\bar{x}} \cdot e^{-i\bar{k}'\bar{x}} = L^3 \delta_{\vec{k}\vec{k}'} =$

$= L^3 \cdot \delta_{n_x n_{x'}} \cdot \delta_{n_y n_{y'}} \cdot \delta_{n_z n_{z'}}$

$\int d\vec{x} \cdot e^{i\bar{k}\bar{x}}\, e^{+i\bar{k}'\bar{x}} = L^3 \delta_{\vec{k}',-\vec{k}}$

2) $\vec{e}_{\vec{k}\rho} \cdot \vec{k} = 0$

$\vec{e}_{-\vec{k}\rho}\, \vec{k} = 0$

3) $\pm \frac{i\omega_k}{c}$ $\qquad \pm i[\vec{k}; \bar{e}_{\bar{k}\rho}]$

4) $\left([\vec{k} \cdot \vec{e}_{\vec{k}\rho}] \cdot [-\vec{k}\, \vec{e}_{-\vec{k}\rho'}] \right) = -((\bar{k}\bar{k})(\bar{e}_{\bar{k}\rho}\bar{e}_{\bar{k}\rho'})$

$-(\bar{k}\bar{e}_{-\bar{k}\rho'})(\bar{k}\bar{e}_{\bar{k}\rho})\Big)$

5) $(\vec{e}_{\vec{k}\rho} \cdot \vec{e}_{\vec{k}\rho'}) \left[\frac{\omega_k^2}{c^2} - \vec{k}^2 \right]$

$$\boxed{H = \sum_{\vec{k},\rho} \hbar\omega_k \cdot a^*_{\bar{k}\rho} \cdot a_{\bar{k}\rho}}$$

энергия эл. поля излучения

$$\vec{p} = \frac{1}{4\pi c}\int d\bar{x}\,[\vec{E} \times \vec{H}]$$

$$\vec{S} = \frac{c}{4\pi}\int_{L^3} d\bar{x}\,[\vec{E} \times \vec{H}]$$

$$= \sum_{\bar{k}\rho} \hbar\vec{k}\, a^*_{\vec{k}\rho}\, a_{\vec{k}\rho}$$

$$\sum_{\vec{k},\rho,\rho'} (\bar{e}_{\bar{k}\rho} \cdot \bar{e}_{-\bar{k}\rho'})\, \bar{k} \cdot a^*_{\vec{k}\rho}\, a_{-\bar{k}\rho'}$$

$\vec{k} \leftrightarrow -\vec{k} \qquad \rho \leftrightarrow \rho'$

а) $\alpha_{\vec{k}p} e^{-i\omega_k t} \equiv \alpha_{\vec{k}p}(t)$

$\alpha_{\vec{k}p} e^{i\omega_k t} = \alpha^*_{\vec{k}p}(t)$

$H = \sum_{k,p} \hbar\omega_k \cdot \alpha^*_{\vec{k}p}(t) \cdot \alpha_{\vec{k}p}(t)$

$\{ \alpha_{\vec{k}p} \alpha^*_{\vec{k}'p'} \} = \frac{1}{i\hbar} \delta_{kk'} \delta_{pp'}$

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

$x(t) = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \left(\alpha \cdot e^{-i\omega t} + \alpha^* e^{i\omega t} \right)$

$p(t) = m\dot{x}$ $\qquad x_0^2 = \frac{\hbar}{\sqrt{km}}$

$H = \hbar\omega \alpha^* \alpha = \hbar\omega \alpha^*(t) \cdot \alpha(t)$ $\qquad \{\alpha, \alpha^*\} = \frac{1}{i\hbar}$

$\hat{x}_r(t) = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \left(\hat{a} e^{-i\omega t} + \hat{a}^+ \cdot e^{i\omega t} \right)$

$[\hat{a}\hat{a}^+] = 1$

$\hat{A}_r(\vec{x}, t) = \sum_{\vec{k},p} \cdot \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k L^3}} \cdot \vec{e}_{\vec{k}p} \cdot$

$\cdot \left[e^{i\vec{k}\vec{x} - i\omega_k t} \left(\hat{a}_{\vec{k}p} \right) + e^{i\omega t - i\vec{k}\vec{x}} \hat{a}^+_{\vec{k}p} \right]$

$[\hat{a}_{\vec{k}p}, \hat{a}^+_{k'p'}] = \delta_{kk'} \cdot \delta_{pp'}$ — канонич. комм. соотн.

$[\hat{a}_{\vec{k}p} \; \hat{a}_{k'p'}] = 0$

$[\hat{a}^+_{\vec{k}p} ; \hat{a}^+_{k'p'}] = 0$ — опер-ов рождения и уничтож. фотонов с $\vec{k}$ и p

$H \to \hbar\omega \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right)$

$\hat{H} = \sum_{\vec{k},p} \hbar\omega_k \left(a^+_{\vec{k}p} a_{\vec{k}p} + \frac{1}{2} \right)$

$\hat{\vec{p}} = \sum_{\vec{k}p} \hbar\vec{k} \left(a^+_{\vec{k}p} a_{\vec{k}p} + \cancel{\frac{1}{2}} \right)$

отбрасываем эн. от $\sum_{\vec{k}p} \hbar\omega_k \cdot \frac{1}{2}$

вакуум:

$a_{\vec{k}p} |0\rangle = 0$

$a^+_{\vec{k}p} |0\rangle = |\psi\rangle$

$\hat{H} |\psi\rangle = \hbar\omega_k |\psi\rangle$

$\hat{\vec{p}} |\psi\rangle = \hbar\vec{k} |\psi\rangle$

$|\psi\rangle = \frac{(a^+_{\vec{k}p})^N}{\sqrt{N!}} |0\rangle$

$\langle\psi| \hat{A} |\psi\rangle = 0$

$|\psi\rangle \equiv e^{-\frac{\alpha\alpha^*}{2}} \cdot e^{\alpha a^+_{\vec{k}p}} |0\rangle$

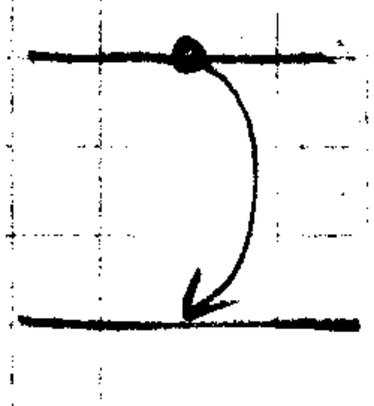
$a_{kp} |\psi\rangle \equiv \alpha |\psi\rangle$

$\langle\psi| \hat{A}_r(\vec{x}, t) |\psi\rangle \Leftrightarrow$

$\left[a_{\vec{k}'p'} |\psi\rangle \equiv 0 \right]$

$\Leftrightarrow \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k L^3}} \vec{e}_{\vec{k}p} \cdot \left(e^{i\vec{k}\vec{x} - i\omega_k t} \alpha + e^{i\omega_k t + i\vec{k}\vec{x}} \alpha^+ \right)$

Излучение



$\hbar\omega = E_1 - E_2$

$$|\psi_i\rangle = |\psi_1\rangle |0\rangle$$

$$E_i \equiv E_1 + 0$$

$$|\psi_f\rangle = |\psi_2\rangle a^+_{\vec{k}p} |0\rangle$$

$$E_f = E_2 + \hbar\omega_k$$

$$H_{I_{em}} = -\frac{e}{mc} \hat{p}\, \hat{A}_{em}(\hat{x}, t)$$

$$A_{em}(x,t) = A_{em}(x,0) \equiv A_{\vec{k}r}(x,0)$$

$$\frac{1}{\tau_i} = W_i = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_f |\langle \psi_f | H_I | \psi_i \rangle|^2 \cdot \delta(E_f - E_i) =$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{k},p} |\langle \psi_f | H_I | \psi_i \rangle|^2 \cdot \delta(E_2 + \hbar\omega_k - E_1)$$

$$\sum_{\vec{k}} \rightarrow \int d\Omega_k \cdot k^2 dk \cdot \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3$$

$$\int k^2 dk \cdot \delta(E_2 - \hbar c k - E_1)$$