③ $\hat{f}_+ \psi = f\psi$

$$\frac{d\psi}{dx} + x\psi = f\psi$$

$$\frac{1}{\psi} d\psi = (f - x)\,dx$$

$$\ln\psi = fx - \frac{x^2}{2} + C_1$$

$$\psi = c e^{fx - \frac{x^2}{2}}$$

$\hat{f}_- \psi = f\psi$

$$\frac{d\psi}{dx} - x\psi = f\psi$$

$$\frac{1}{\psi} d\psi = (f + x)\,dx$$

$$\ln\psi = fx + \frac{x^2}{2} + C_2$$

$$\psi = c e^{fx + \frac{x^2}{2}}$$

---

① $\hat{A} = \left(i\frac{\partial}{\partial r}\right)^+$

$$\int \psi_1^* \hat{A} \psi_2 \, dq = \int (\hat{A}^+ \psi_1)^* \psi_2 \, dq$$

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \psi_1^*(r,\theta,\varphi)\, i\, \frac{\partial \psi_2(r,\theta,\varphi)}{\partial r}\, r^2 \sin\theta \, dr\, d\varphi\, d\theta = 4\pi \int_0^\infty \psi_1^* \left(i \frac{\partial \psi_2}{\partial r}\right) r^2 dr =$$

$$= 4\pi i \left(\underbrace{\psi_1^* \psi_2 r^2 \Big|_0^\infty}_{0} - \int_0^\infty \psi_2 r^2 \frac{\partial \psi_1^*}{\partial r} + 2r\psi_1^*\psi_2 \, dr \right) = 4\pi \int_0^\infty \left[i\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{2}{r}\right)\psi_1 \right]^* \cdot \psi_2 r^2 dr =$$

$$= \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \left[i\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{2}{r}\right)\psi_1 \right]^* \psi_2 r^2 \sin\theta \, dr\, d\theta\, d\varphi$$

Ответ: $\left(i\frac{\partial}{\partial r}\right)^+ = i\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{2}{r}\right)$

---

② $\psi = c e^{\frac{ip_0 x}{\hbar} - \frac{x^2}{a^2}}$

$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ – дисперсия координаты

$\left.\begin{array}{l} \langle x \rangle = \int \psi^* x \psi \, dx \\ \langle x^2 \rangle = \int \psi^* x^2 \psi \, dx \end{array}\right\}$ подставляю ψ и нахожу

$\langle (\Delta p)^2 \rangle = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2$ – дисперсия импульса

$\left.\begin{array}{l} \langle p \rangle = -i\hbar \int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx \\ \langle p^2 \rangle = -i\hbar^2 \int \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} dx \end{array}\right\}$ ψ и нахожу

Условие минимизации соотнош. неопред. Гейз.: $\sqrt{\langle (\Delta x)^2 \rangle} \cdot \sqrt{\langle (\Delta p)^2 \rangle} = \frac{\hbar}{2}$

Находим дисперсии, подставляем, проверяем

---

④ ~~[illegible]~~

• $[\hat{x}, \hat{L}_z] = [\hat{x}, x\hat{p}_y - y\hat{p}_x] = \hat{x}(x\hat{p}_y - y\hat{p}_x) - (x\hat{p}_y - y\hat{p}_x)\hat{x} = \underbrace{x^2\hat{p}_y}_{0} - \underbrace{xy\hat{p}_x}_{0} + y\hat{p}_x x =$

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

• $[\hat{p}_x, \hat{L}_z] = [\hat{p}_x, x\hat{p}_y - y\hat{p}_x] = \hat{p}_x(x\hat{p}_y - y\hat{p}_x) - (x\hat{p}_y - y\hat{p}_x)\hat{p}_x = \underbrace{\hat{p}_x x\hat{p}_y}_{0} - \underbrace{\hat{p}_x y\hat{p}_x}_{0} -$

$- x\hat{p}_y\hat{p}_x + \underbrace{y\hat{p}_x^2}_{0} = -i\hbar\hat{p}_y$

⑤ $\psi_2(x) = \psi_1(x)\, e^{\frac{ip_0 x}{\hbar}}$

$\langle x_1\rangle = \int \psi_1^* \hat{x}\, \psi_1\, dx \to 1$

$\langle x_2\rangle = \int \underbrace{\psi_1^* e^{-\frac{p_0 x i}{\hbar}}}_{\psi_2^*} \cdot \hat{x} \cdot \underbrace{\psi_1 e^{\frac{ip_0 x}{\hbar}}}_{\psi_2}\, dx$

- $\langle x_1\rangle = \langle x_2\rangle$

$\langle p_1\rangle = \int \psi_1^* (-i\hbar) \frac{d\psi_1}{dx}\, dx$

$\langle p_2\rangle = \int \psi_1^* e^{-\frac{p_0 x i}{\hbar}} (-i\hbar)\left(\frac{d\psi_1}{dx} e^{\frac{p_0 x i}{\hbar}} + \psi_1 \frac{ip_0}{\hbar} e^{\frac{ip_0}{\hbar}x}\right) dx = \underbrace{\int \psi_1^* (-i\hbar)\frac{d\psi_1}{dx}\, dx}_{\langle p_1\rangle} + \int \psi_1^* \psi_1\, p_0\, dx = \langle p_1\rangle + p_0.$

- $\langle p_2\rangle = \langle p_1\rangle + p_0$

---

⑥ $\psi(\varphi) = C(2i + \sin 2\varphi)$; $\begin{cases} e^{i2\varphi} = \cos 2\varphi + i \sin 2\varphi \\ e^{-i2\varphi} = \cos 2\varphi - i \sin 2\varphi \end{cases} \to \sin 2\varphi = \frac{e^{i2\varphi} - e^{-i2\varphi}}{2i}$

Собст. функц $\hat{L}_z \to \psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$

Тогда → $\psi(\varphi) = C\left(2\sqrt{2\pi}\, i\, \psi_0(\varphi) + \frac{\sqrt{2\pi}}{2i}\psi_2 - \frac{\sqrt{2\pi}}{2i}\psi_{-2}\right) = C\left(2\sqrt{2\pi}\, i\, \psi_0 - \frac{i\sqrt{2\pi}}{2}\psi_2 + \frac{i\sqrt{2\pi}}{2}\psi_{-2}\right)$

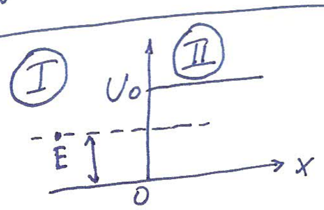
Из усл. нормировки: $\int_0^{2\pi} \psi^* \psi\, d\varphi = 1 \to$ при подстановке получаем $|C| = \frac{1}{3\sqrt{\pi}}$

Тогда $\psi(\varphi) = \frac{2\sqrt{2}\, i}{3}\psi_0 - \frac{\sqrt{2}\, i}{6}\psi_2 + \frac{\sqrt{2}\, i}{6}\psi_{-2} = a_0\psi_0 + a_2\psi_2 + a_{-2}\psi_{-2}$

и, $\begin{cases} L_z = 0 \text{ с вер. } |a_0|^2 = \frac{8}{9} \\ L_z = \pm 2\hbar \text{ с вер } |a_{\pm 2}|^2 = \frac{1}{18} \end{cases}$

---

⑧ $U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ V_0, & x > 0 \end{cases}$



Пусть $k_1 = \frac{\sqrt{2ME}}{\hbar}$ и $k_2 = \frac{\sqrt{2M(V_0 - E)}}{\hbar}$

I: $\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2M}{\hbar^2} E \psi_1(x) = 0$

II: $\frac{d^2\psi_2}{dx^2} - \frac{2M}{\hbar^2}(V_0 - E)\psi_2(x) = 0$

Решениями будут ур.:

$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}$

$\psi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}$ ($A_2 = 0$, т.к. $\psi_2(x)$ огранич.)

Из условий сшивания $\psi_1(0) = \psi_2(0)$ и $\left.\frac{\partial \psi_1}{\partial x}\right|_{x=0} = \left.\frac{\partial \psi_2}{\partial x}\right|_{x=0}$

Получаем: $\left.\begin{matrix} A_1 + B_1 = B_2 \\ ik_1 A_1 - ik_1 B_1 = -k_2 B_2 \end{matrix}\right\}$ Откуда $B_1 = \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2}$

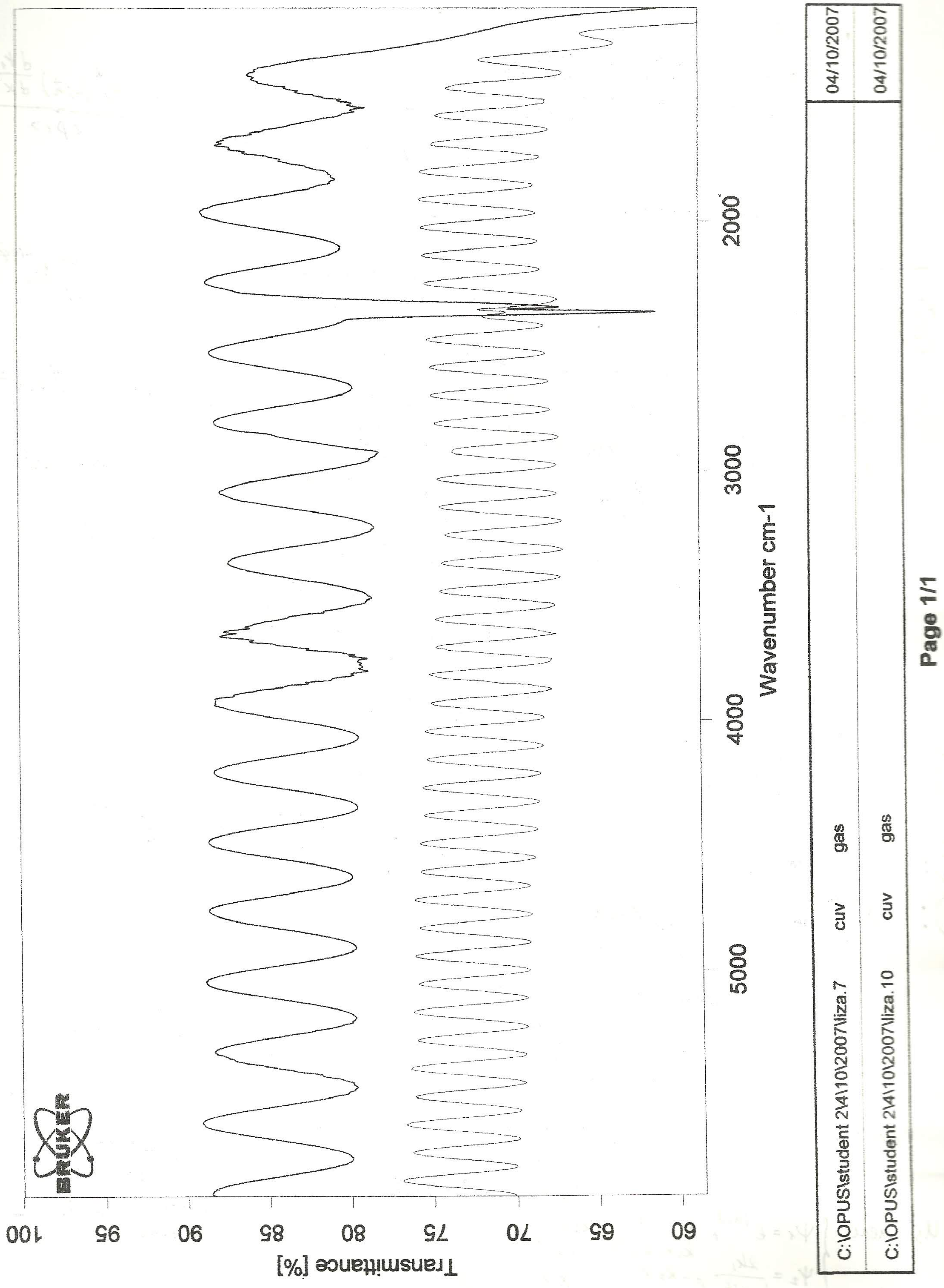
и $B_2 = \frac{2k_1}{k_1 + ik_2}$, а $A_1 = 1$

Из чего $\begin{cases} \psi_1 = e^{ik_1 x} + \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2} e^{-ik_1 x}, & x < 0 \\ \psi_2 = \frac{2k_1}{k_1 + ik_2} e^{-k_2 x}, & x > 0 \end{cases}$

Тогда $j_{пад} = \frac{\hbar}{2Mi}\left(\Psi^*_{пад}\frac{d\Psi_{пад}}{dx} - \Psi_{пад}\frac{d\Psi^*_{пад}}{dx}\right) = \frac{\hbar k_1}{M}$

$j_{отр}$ = Аналогично для $\Psi_{отр} = \frac{\hbar k_1}{M}$

Тогда $R = \frac{|j_{отр}|}{|j_{пад}|} = 1$



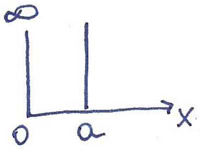
(9) $M_{\bar{e}}$ и M_{He} — R_{He} и r_1, r_2

масса $\bar{e}$; масса ядра; рад-вектор ядра; радиус-векторы $\bar{e}$

$$U = -\frac{2e^2}{|R-r_1|} - \frac{2e^2}{|R-r_2|} + \frac{e^2}{|r_1-r_2|}, \text{ где } e \text{ — заряд } \bar{e}$$

Тогда
$$H = -\frac{\hbar^2}{2M_{He}}\Delta_R - \frac{\hbar^2}{2M_{\bar{e}}}(\Delta_{r_1} + \Delta_{r_2})$$
$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

(10)/(11)



$$\psi(x,t=0) = c\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\underbrace{\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)}_{1-2\sin^2\frac{\pi x}{a}}$$

10) $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi n x}{a}\right)$

$\psi(x) = \sum a_n \psi_n(x)$

$$\psi(x,t=0) = c\sin\frac{\pi x}{a} - \underbrace{2c\sin^3\frac{\pi x}{a}}_{2c\left(\frac{3}{4}\sin\frac{\pi x}{a} - \frac{1}{4}\sin\frac{3\pi x}{a}\right)} = c\sqrt{\frac{2}{a}}\sqrt{\frac{a}{2}}\sin\frac{\pi x}{a} - \frac{3}{4}2c\sqrt{\frac{a}{2}}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a} + \frac{2c}{4}\sqrt{\frac{a}{2}}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{3\pi x}{a} =$$

$$= c\sqrt{\frac{a}{2}}\psi_1 - c\sqrt{\frac{a}{2}}\cdot\frac{3}{2}\psi_1 + \frac{c}{2}\sqrt{\frac{a}{2}}\psi_3 = -\frac{c}{2}\sqrt{\frac{a}{2}}\psi_1 + \frac{c}{2}\sqrt{\frac{a}{2}}\psi_3$$

Из нормировки $\int\limits_0^\infty \psi_n^*(x)\psi_n(x)dx = 1 \to \frac{c^2}{4}\frac{a}{2} + \frac{c^2}{4}\frac{a}{2} = 1 \to c = \frac{2}{\sqrt{a}}$

Откуда $\psi(x,t) = -\frac{1}{2}\frac{2}{\sqrt{a}}\sqrt{\frac{a}{2}}\psi_1 e^{-\frac{iE_1}{\hbar}} + \frac{1}{2}\frac{2}{\sqrt{a}}\sqrt{\frac{a}{2}}\psi_3 e^{-\frac{iE_3}{\hbar}}$

$$e^{-\frac{i\pi^2\hbar^2 t}{2a^2\hbar}} \qquad e^{-\frac{i\pi^2\hbar^2 9}{2a^2\hbar}}$$

11) $\psi(x,t=0) = c\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)$

$$\psi(x,t=0) = 2c\sin\frac{\pi x}{a}\underbrace{\cos\frac{\pi x}{a}\cos\frac{\pi x}{a}}_{1-\sin^2\frac{\pi x}{a}} = \underbrace{2c\sin\frac{\pi x}{a} - 2c\sin^3\frac{\pi x}{a}}$$

Все тоже что и (10) только 2.

(12) $U(r) = \begin{cases} 0, & \text{при } r < a \\ \infty, & \text{при } r > a \end{cases}$

Внутри ямы: $\frac{d^2(\chi)}{dr^2} + k^2\chi = 0$, где $k^2 = \frac{2ME}{\hbar^2}$

Решение ур: $A\sin(kr) + B\cos(kr)$

$\chi(0) = 0 \to B = 0$

$\chi(a) = A\sin ka = 0 \to ka = \pi n$

из чего
$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2Ma^2}n^2}$$

Из усл. нормировки ищем A:

$$\int\limits_0^a |R(r)|^2 r^2 dr = \int\limits_0^a |\chi(r)|^2 dr = |A|^2\int\limits_0^a \sin^2(kr)dr = 1 = |A|^2\int\limits_0^a \sin^2\left(\frac{\pi n}{a}r\right)dr = \frac{a}{2}$$

$A = \sqrt{\frac{2}{a}}$

Из чего радиальная волн. функц: $R_n(r) = \sqrt{\frac{2}{a}}\frac{\sin\left(\frac{\pi n}{a}r\right)}{r}$

Но учитывая $Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \to \boxed{\psi_{n00}(r,\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{1}{2\pi a}}\frac{\sin\left(\frac{\pi n}{a}r\right)}{r}}$

(13) $\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$

$$\langle T\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*\left(\frac{x}{x_0}\right)\hat{T}\psi_1\left(\frac{x}{x_0}\right)d\frac{x}{x_0} = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{2x_0\sqrt{\pi}}e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}\left(\frac{x}{x_0}\right)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{d^2\psi_1}{dx^2}dx =$$

$$\psi_n = \frac{1}{2x_0\sqrt{\pi}}e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}2\left(\frac{x}{x_0}\right)$$

$$= \frac{3}{4}\hbar\omega$$

$$\langle p^2\rangle = \frac{3}{4}\hbar\omega\cdot 2m$$

$$\langle p\rangle = \underbrace{\int c_1^2 e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}\cdot\frac{2x}{x_0}\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)\left[e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}2\frac{x}{x_0}\right]dx = 0}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_1^*\left(\frac{x}{x_0}\right)\hat{p}\psi_1\left(\frac{x}{x_0}\right)d\left(\frac{x}{x_0}\right)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{x}{x_0}e^{-\frac{x^2}{x_0^2}}d\left(\frac{x}{x_0}\right) + \int_{-\infty}^{+\infty}x^3e^{-\frac{x^2}{x_0^2}}d\left(\frac{x}{x_0}\right)$$

нечет чет нечет четн

$$\langle \Delta p^2\rangle = \langle p\rangle^2 + \langle p^2\rangle = \langle p^2\rangle = \boxed{\frac{3}{4}\hbar\omega 2m}.$$

(14) $\psi = c(3\sin\Theta\cos\varphi + 2i) = c\left(\frac{3}{2}\sin\Theta e^{i\varphi} + \frac{3}{2}\sin\Theta e^{-i\varphi} + 2i\right)$

$e^{i\varphi} = \cos\varphi + i\sin\varphi$

$e^{-i\varphi} = \cos\varphi - i\sin\varphi$

$\cos\varphi = \frac{e^{i\varphi}+e^{-i\varphi}}{2}$

$Y_{10} = \cos\Theta\sqrt{\frac{3}{4\pi}}$

$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\Theta e^{i\varphi}$

$Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\Theta e^{-i\varphi}$

$$\psi = c\left(-\frac{3}{2}\sqrt{\frac{8\pi}{3}}Y_{11} + \sqrt{6\pi}Y_{1-1} + 2iY_{00}\sqrt{4\pi}\right)$$

$$c = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\psi^*\psi\underbrace{\sin\Theta d\Theta d\varphi}_{dV} = 1$$

$$c^2 = \left(6\pi\int Y_{11}Y_{11}^* dV + 6\pi\int Y_{1-1}Y_{1-1}^* dV + 4\cdot 4\pi\right) = 1$$

$c = \frac{1}{\sqrt{28}} \rightarrow \psi = -\sqrt{\frac{3}{14}}Y_{11} + \sqrt{\frac{3}{14}}Y_{1-1} + \frac{2}{\sqrt{7}}iY_{00} = \sum a_i(Y_{\ell m})_i$

$\sqrt{P}$

	L_z	P
$l=0$, $m=0$	0	$\frac{4}{7}$
$l=1$, $m=1$	$\hbar$	$\frac{3}{14}$
$l=1$, $m=-1$	$\hbar$	$\frac{3}{14}$

(15) $\langle\cos\Theta\rangle = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\psi^*\cos\Theta\,\cancel{\varphi}\sin\Theta d\Theta d\varphi = -\frac{1}{\cancel{4\pi}}\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}\cos\Theta d\cos\Theta = 0$

$|J|$

$\psi = Y = (-1)^0\cdot 1\sqrt{\frac{1}{2}}\cdot 1\cdot\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$

$\Theta(\theta)$ $\quad \Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}$

$$\langle\cos^2\theta\rangle = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\psi^*\cos^2\theta\sin\theta d\theta d\varphi = -\frac{1}{\cancel{4\pi}}\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}\cos^2\theta d\cos\theta = -\frac{1}{\cancel{2}}\frac{\cos^3\theta}{3}\Big|_0^{\pi} = \frac{1}{3}$$

(16) / (17) $\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-\frac{r}{a_0}}$

16) Вер. того, что частица находится в обл от r до $r+dr$ определ. выражением: $dP = 4\pi|\psi_{100}(r)|^2r^2dr$

Тогда наиболее вер. раст между $\bar{e}$ и ядром соотв. max

Дифф. по r и приравн. производн. к 0: $\boxed{r_{вер} = a_0}$

17) Ср. знач. потенц. энергии $\bar{e}$ в поле ядра $U(r) = -\frac{e^2}{r}$ вычисляется след. формулой

$$\langle U\rangle = -4\pi e^2\int_0^{\infty}\psi_{100}(r)\,r\,dr = -\frac{4e^2}{a_0^3}\int_0^{\infty}e^{-\frac{2r}{a_0}}\cdot r\,dr =$$

$$= \boxed{-\frac{e^2}{a}}$$

(19) $a = 10^{-12}$ см

$\Delta p \Delta x \sim \frac{\hbar}{2}$

$\Delta x \sim a$

$\Delta p \approx \frac{\hbar}{2a} \approx p$

$p = mV \to V = \frac{\hbar}{2am}$

$\nu = \frac{V}{a} = \frac{\hbar}{2ma^2}$

(18) $\Psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$

$\Psi_p = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r})}$

$a_p = \int \Psi_p^* \Psi dr$

$a_p = \int \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r})} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a}} dr = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3 \pi a_0^3}} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_0^\infty e^{-\left(\frac{1}{a_0} + \frac{i}{\hbar} pr\cos\Theta r\right)} \cdot r^2 \sin\Theta \, dr d\varphi d\Theta$

... и в итоге $|a_p|^2 = \frac{64\pi^2}{a_0^2 8\pi^3 \hbar^3 \pi a_0^3} \cdot \left(\frac{1}{(a_0^2 + \frac{p^2}{a^2})}\right)^4 = \frac{8\hbar^5}{\pi^2 a_0^5 \left(\frac{\hbar^2}{a_0^2} + p^2\right)^4}$

(20) $S = \frac{1}{2}$, $S_z = \frac{\hbar}{2}$, $\langle \widehat{z z'} \rangle = \Theta$

$\hat{S}_{z'} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \cos\Theta & e^{-i\varphi}\sin\Theta \\ e^{i\varphi}\sin\Theta & -\cos\Theta \end{pmatrix}$, а $\chi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ для $S_z = \frac{\hbar}{2}$

Тогда (1) $\langle S_{z'} \rangle = \langle \chi | \hat{S}_{z'} | \chi \rangle = \frac{\hbar}{2} (1\ 0) \begin{pmatrix} \cos\Theta & e^{-i\varphi}\sin\Theta \\ e^{i\varphi}\sin\Theta & -\cos\Theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\cos\Theta$

не учитывала

С др. стороны (2) $\langle S_{z'} \rangle = \frac{\hbar}{2} W_+ - \frac{\hbar}{2} W_-$

вер. проекции спина <u>вдоль</u> и <u>противоположно</u> оси z'

из (1) и (2) $W_+ - W_- = \cos\Theta$

$\underbrace{W_+ + W_- = 1}$

$\boxed{W_+ = \cos^2\frac{\Theta}{2}}$ и $\boxed{W_- = \sin^2\frac{\Theta}{2}}$

<u>Дисперсия</u>: $\langle S_{z'}^2 \rangle = \langle \chi | \hat{S}_z^2 | \chi \rangle = (1\ 0) \begin{pmatrix} \cos\Theta & e^{-i\varphi}\sin\Theta \\ e^{i\varphi}\sin\Theta & -\cos\Theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\Theta & e^{-i\varphi}\sin\Theta \\ e^{i\varphi}\sin\Theta & -\cos\Theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} =$

$= (1\ 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1$

$\langle \Delta S_z^2 \rangle = \langle S_z^2 \rangle - \langle S_z \rangle^2 = 1 - \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \cos^2\Theta = \boxed{\sin^2\Theta}$

21 $\hat{V} = \alpha x y$

X, Y, M, ω

$$\Psi_{n_1 n_2} = \Psi_{n_1}\cdot\Psi_{n_2} = \frac{e^{-\frac{x^2}{x_0^2}}\cdot e^{-\frac{x^2}{x_0^2}}}{x_0\sqrt{2^{n_1+n_2}}\sqrt{\pi n_1! n_2!}}\cdot H_{n_1}\left(\frac{x}{x_0}\right)\cdot H_{n_2}\left(\frac{x}{y_0}\right)$$

$H_0(\xi) = 1;\ H_1(\xi) = 2\xi$

$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}}$

$$E^{(0)}_{n_1+n_2} = \hbar\omega(n_1+n_2+1) = 2\hbar\omega$$

n_1, n_2: 1 0; 0 1

$$\Psi^{(0)}_{1,0} = \frac{e^{-\frac{(x^2+y^2)}{2x_0^2}}}{x_0\sqrt{2\pi}}\cdot 2\frac{x}{x_0}$$

$$\Psi_{0,1} = \frac{e^{-\frac{(x^2+y^2)}{2x_0^2}}}{x_0\sqrt{2\pi}}\cdot 2\frac{y}{x_0}$$

$$\Psi^{(0)} = C_1\Psi^{(0)}_{1,0} + C_2\Psi^{(0)}_{0,1}$$

$(\hat{H}_0+\hat{V})\Psi^{(0)} = E\Psi^{(0)}$ домножаем на $\Psi^{(0)}_{1,0}$ и интегр

1) $C_1 \leftarrow \int\Psi^{(0)*}_{1,0}\hat{H}_0 C_1\Psi^{(0)}_{1,0}\,dq + \int\Psi^{(0)*}_{1,0}\hat{H}_0 C_2\Psi^{(0)}_{0,1}\,dq +$

$V_{11} \leftarrow + \int\Psi^{(0)}_{1,0}\hat{V}C_1\Psi^{(0)}_{1,0}\,dq + \int\Psi^{(0)}_{1,0}\hat{V}C_2\Psi^{(0)}_{0,1}\,dq \;\cancel{+} \rightarrow V_{12}$

$C_1 \leftarrow \cancel{+} \int\Psi^{(0)}_{1,0}E\,C_1\Psi^{(0)}_{1,0}\,dq - \int\Psi^{(0)}_{1,0}E\,C_2\Psi^{(0)}_{0,1}\,dq = 0 \rightarrow 0$

① $C_1(E_1^{0} + V_{11} - E) + C_2V_{12} = 0$

Аналогично 2) домнож. на $\Psi^{(0)}_{0,1}$ и интегр.

② $C_1V_{21} + C_2(E_2^{(0)} + V_{22} - E) = 0$

$$\begin{vmatrix} E_1^{(0)} - E + V_{11}, & V_{12} \\ V_{21}, & E_2^{(0)} - E + V_{22}\end{vmatrix} = 0$$

1) 2) 3) 4) 5)

Далее

$$V_{11} = \int\Psi^{(0)*}_{1,0}\hat{V}\Psi^{(0)}_{1,0}\,dq = \iint_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{-\frac{x^2}{x_0^2}}e^{-\frac{y^2}{x_0^2}}}{2\pi x_0^2}4\frac{x^2}{x_0^2}\alpha x y\,dx\,dy = 0$$

$\hat{V} = \alpha x y$

$$V_{12} = \int\Psi^{(0)*}_{1,0}\hat{V}\Psi^{(0)}_{0,1}\,dq = \iint_{-\infty}^{\infty}2\frac{e^{-\frac{x^2}{x_0^2}}e^{-\frac{y^2}{x_0^2}}}{\pi x_0^2}\frac{x}{x_0}\frac{y}{x_0}\alpha x y\,dx\,dy = \frac{\hbar\alpha}{2M\omega}$$

$$\begin{vmatrix} 2\hbar\omega - E, & \frac{\hbar\alpha}{2M\omega} \\ \frac{\hbar\alpha}{2M\omega}, & 2\hbar\omega - E\end{vmatrix} = 0 \rightarrow 4\hbar^2\omega^2 = 4\hbar\omega E + E^2 - \frac{\hbar^2\alpha^2}{4M^2\omega^2}$$

$$E_{\pm} = 2\hbar\omega \pm \frac{\alpha\hbar}{2M\omega}$$

$\left.\begin{array}{l} C_1 = C_2 \\ C_1 = -C_2 \end{array}\right\}$

$\Psi = C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2$

$\Sigma|C_i|^2 = 1 \longrightarrow C_1^2 + C_2^2 = 1 \rightarrow C_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \rightarrow \Psi_1^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\Psi^{(0)}_{10} + \Psi^{(0)}_{01}\right)$

$\Psi_2^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\Psi^{(0)}_{10} - \Psi^{(0)}_{01}\right)$

22

$$E = E_0 e^{-\frac{|t|}{\tau}} \longrightarrow \hat{V} = \underbrace{qE_0 x}_{W(x)}\, \underbrace{e^{-\frac{|t|}{\tau}}}_{g(t)}$$

1) $$W_{mn} = \frac{2}{a}\int_0^a \sin\frac{\pi m x}{a}\, qE_0 x\, \sin\frac{\pi n x}{a}\, dx =$$

$$= \frac{2qE_0}{2a}\int_0^a \left(\cos\frac{\pi(m-n)x}{a} - \cos\frac{\pi(m+n)x}{a}\right) x\, dx = \frac{a^2 qE_0}{a\pi^2}\left[-\frac{2}{(m-n)^2} + \frac{2}{(m+n)^2}\right]$$

2) $$G = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_{mn}t} e^{-\frac{|t|}{\tau}}\, dt = \int_0^{\infty} e^{-(i\omega_{mn}+\frac{1}{\tau})t}\, dt + \int_{-\infty}^{0} e^{-i\omega_{mn}t} e^{\frac{t}{\tau}}\, dt =$$

$$= \frac{2\tau^2}{\tau(1+\omega_{mn}^2\tau^2)}$$

$$P_{mn} = \frac{256 q^2 E_0^2 a^2 m^2 n^2 \tau^2}{\hbar^2 \pi^2 (m^2-n^2)^4 (1+\omega_{mn}^2\tau^2)^2} = G^2 \cdot W_{mn}^2$$

23 $\psi(x) = e^{-\alpha|x|}\cdot c$

1) $$c^2\int e^{-2\alpha|x|}\, dx = 1 \rightarrow c^2\left[\int_0^{\infty} e^{-2\alpha x}\, dx + \int_{-\infty}^{0} e^{2\alpha x}\, dx\right] = \frac{c^2}{\alpha} = 1 \rightarrow c = \sqrt{\alpha}$$

2) $c \rightarrow 1)$ $$J = \alpha\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha|x|}\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2}\right) e^{-\alpha|x|}\, dx = \frac{1}{2}\left(-\frac{4\alpha^4\hbar^2 + m^2\omega^2}{4\alpha^2 m}\right)$$

$$\frac{\partial J}{\partial \alpha} \quad J'_\alpha = -\frac{2\alpha\hbar^2}{2m} - \frac{m\omega^2}{4\alpha^3} = 0 \rightarrow \alpha_0 = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}$$

3) $$J_{\alpha_0} = E_0 = \frac{-4\frac{m^2\omega^2}{4\hbar^2}\cdot\hbar^2 + m^2\omega^2}{8\frac{m\omega}{2\hbar}\cdot m} = 0 \left(\frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}}\right)$$

Если НУЖНА 7 задача или объяснение к задачам или к билетам обращаться индивидуально =)

(1.) • ~~Основные постулаты~~: 1) Состояние квантовой системы из N микрочастиц полностью определяется функцией состояния, или волновой функц. $\Psi(r_1, \ldots, r_n, t)$, где $r_1, \ldots, r_n$ - радиус-векторы частиц.

2) Каждая физ. величина A (коорд. x, импульс p_x) представляется линейным оператором $\hat{A}$, и ср. ее значение в квант. состоянии, определяемом функц. Ψ, задается интегралом:

$$\underbrace{\langle a \rangle = \int \Psi^* \hat{A} \Psi d\tau = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle}_{\text{дираковское обозначение}}$$

3) Изменение функции состояния во времени определяется ур. Шредингера $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi$

гамильтониан

4) Наличие у частицы специфич. внутр. степени свободы. Этой степени свободы приписывают собств. момент импульса микрочастицы (спин)

• Квантовое состояние ~~системы~~ считается заданным, если задана некоторая функция пространственных переменных частиц и времени, которая позволяет вычислить все характеристики системы частиц. Эта функция — волновая функция

• Волновая функция - функция лишь координат частиц и времени

— Для каждой наблюдаемой A должен быть задан соответств. ей оператор, переводящ. волн. функц в новую функц, которая вместе с волновой позволяет определить численное значение этой наблюдаемой.

— Физ. смысл имеет квадрат модуля волн. функц — плотность вероятности обнаружения частицы в момент t в точке с коорд q

$$|\Psi(q,t)|^2 = \Psi^*(q,t)\Psi(q,t)$$

③ $\Psi_{слева}(x_0) = \Psi_{справа}(x_0)$; $\Psi_л'(x_0) = \Psi_{пр}'(x_0)$

- непрерывна
- однозначна
- огран.

• Свойства Ψ: ① Ψ и ее первая производная непрерывн ② Ψ всюду огранич.

• По скольку вероятность обнаружить микрочаст во всем пространстве = 1:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(q,t)|^2 dq = 1$$ — условие нормировки.

(2) • Под ~~оператором~~ понимают правило, по которому одной функц. Ψ сопоставл. другая φ: $\hat{F}\Psi = \varphi$

• Лин. операторы обладают св-вами: 1) $\hat{F}(\Psi + \varphi) = \hat{F}\Psi + \hat{F}\varphi$

2) $\hat{F}(\alpha\Psi) = \alpha\hat{F}\Psi$

Эрмитов оператор: $\int \varphi^*(q)\hat{F}\Psi(q)dq = \int (\hat{F}^+\varphi(q))^*\Psi(q)dq$

$\hat{F}^+$ — эрмитово-сопряж.

если $\hat{F} = \hat{F}^+$, то оператор эрмитов

Унитарные операторы: ~~в случае~~ ... $\hat{V}$ - унитарный, если $\hat{V}\hat{V}^+ = \hat{V}^+\hat{V} = \hat{1}$

<u>Операторы</u>: $-\hat{Q}\psi=\psi^2$ $\quad -\hat{I}\psi(x)=\psi(-x)$ $\quad -\hat{p}\psi(r)=-i\hbar\nabla\psi(r)$

$-\hat{D}\psi(x)=\frac{d\psi}{dx}$ $\quad -\hat{r}\psi(r)=r\psi(r)$ $\quad -\hat{x}\psi(x)=x\psi(x)$

$-\hat{H}\psi=-\frac{1}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{k}{2}x^2$

• Все те числа F, при которых $\hat{F}\psi=F\psi$ имеет ненулевые решения ψ, называются <u>собств. знач.</u> оператора $\hat{F}$, а соответствующие функции ψ - собств. функц. оп. $\hat{F}$.

Совокупность всех <u>собств. знач</u> $\hat{F}$ - его <u>спектр</u>

Если собств. знач. F_n соответств S линейн. независимых собств. функц., то собствен. знач. F_n называется s-кратно вырожденным

• Если имеется множество ф. ψ_i $(i=1,2,\dots,n)$, то с этими функциями для заданного опер. A можно вычислить совокупность чисел: $A_{ij}=\langle\psi_i|A|\psi_j\rangle$

Они могут быть записаны в виде матрицы, где ↑ матричн. элемент операт. A

номер строки - i, номер столбца - j

③ • Операторы:
- координат: $\hat{x}\psi=x\psi$
- импульса: $\hat{p}_x\psi=-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}$
- момент импульса: $\hat{L}_x\psi=\hat{y}\hat{p}_z\psi-\hat{z}\hat{p}_y\psi$ (или $\hat{L}_z\psi=-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}$ - углов)
- кин. энергии: $\hat{T}=-\frac{\hbar^2}{2m}\underbrace{\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)}_{\Delta}$
- потенц. энергия: если зависит только от положения в пространстве и времени, то $\hat{V}\psi=V(r,t)\psi$ (произведение на V)
- Гамильтона $\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V(r,t)$ — спина: $\hat{S}_x\hat{S}_y-\hat{S}_y\hat{S}_x=i\hbar\hat{S}_z$

$\hat{S}_x=\begin{pmatrix}0 & -i\frac{\hbar}{2}\\ i\frac{\hbar}{2} & 0\end{pmatrix}$

• Если известна волн. ф. $\psi(q,t)$, то ср. знач. физ. величины F:

$$\langle F\rangle=\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle=\int\psi^*(q,t)\hat{F}\psi(q,t)dq$$

• Дисперсия физ. величины F определяется:

$$\langle(f)^2\rangle=\langle(F-\langle F\rangle)^2\rangle=\langle F^2\rangle-\langle F\rangle^2$$

④ • Для 2-ух произвольных линейных опер. A и B <u>коммутатором</u> называют оператор C, определяемый:

$$C=AB-BA$$

Если $C=0$, то A и B коммутируют.

• 1) $[\hat{x}\hat{p}_x]=i\hbar$ $\quad$ 2) $[\hat{x},\hat{y}]=0$ $\quad$ 3) $[\hat{x}\hat{L}_y]=i\hbar z$ } Примеры

• Пусть $[\hat{A}\hat{B}]=\hat{C}$, тогда в качестве разброса получаем. при измерен. физ. величины F относит среднего берут среднеквадратичн. откл: $\Delta F=\sqrt{\langle(\Delta F)^2\rangle}$

и $\Delta A\Delta B\geq\frac{|\langle C\rangle|}{2}$ - это <u>соотношение</u> <u>неопределенностей</u>

(5) • Изменение функц. состояния Ψ во времени определяется ур. Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi(q,t)$$

$\hat{H}$ → гамильтониан

Это ур. полностью определ. функц. Ψ при задан. функц. сост. в нач. момент времени: $\Psi(r, t=0) \equiv \Psi_0$

• Стац. ур. Шредингера: $\hat{H}\Psi(q) = E\Psi(q)$, что представляет собой задачу на собств. знач. и собств. функц. опер. $\hat{H}$

• Если известны решения стац. ур. Шредингера, то решение можно записать в виде: $-\ \Psi_n(q,t) = \sum_n a_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\Psi_n(q)$ для дискретного спектра

$-\ \Psi(q,t) = \int a_E e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\Psi_E(q)\,dE$ для непрерывн. спектра

где $a_{n(E)} = \int \Psi^*_{n(E)}(q)\Psi(q,t=0)\,dq$

• Уравнение непрерывности: $\frac{\partial\rho}{\partial t} + \underbrace{div\, j}_{\nabla j} = 0$, где $\rho = |\Psi|^2$

$j = \frac{\hbar}{2Mi}(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*)$

вектор плотность потока вероятности

В электродинамике ρ - плотность заряда,
j - плотность эл. тока.

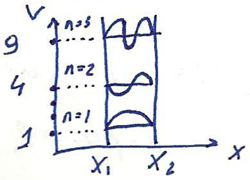
(6)/(7) Одномерным называется движение системы с 1 степенью свободы.
Задача опред. волн. функции сводится к

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2M}{\hbar^2}[E - U(x)]\Psi(x) = 0$$

Ψ и $\frac{\partial\Psi}{\partial x}$ должны быть непрерывны
Ψ должна быть всюду ограничена

а) Потенц. ящик: Рассмотрим задачу о нахожд. реш. стац. ур. Шредингера когда $U(x) = 0$ при $x_1 \le x \le x_2$ и $U(x) = \infty$ $x \notin [x_1, x_2]$

Пусть $x_1 = -\frac{L}{2}$ и $x_2 = \frac{L}{2}$, L - длина ящика



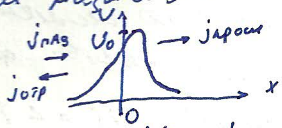
В обл $x \notin [x_1, x_2]$ $\Psi = 0$

В ящике же $-\frac{1}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2} = E\Psi$, общ. решение которого $\Psi_E(x) = A\sin\sqrt{2mE} + B\cos\sqrt{2mE}$

Используя границ. условия находим, что решение:
$\Psi_n = A_n\sin\frac{\pi n}{L}\left(x + \frac{L}{2}\right)$, при $E_n = \frac{\pi^2}{2mL^2}n^2$

Дискретн. знач. энерг - энерг. уровни, а низш. уровень — основной
След. за осн. - первое возбужд., второе ... и т.д.

б) Потенц. барьер: Потенц. барьером назыв. зависимость $U(x)$ вида:



При прохожд. через пот. бар. имеются три потока частицы: падающ., отраж., прошедш.

коэф. отраж $R = \left|\frac{j_{отр}}{j_{пад}}\right|$ и коэф. прохожд $D = \frac{|j_{прош}|}{|j_{пад}|}$

где j_i - плотность потока вероятности для прох, отр, пад. частиц $j = \frac{\hbar}{2Mi}(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*)$

в) Гармонич. осц. – частица движ. в одном измерении x под воздейств. гармонич. потенц. $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$, где $k = \frac{d^2V}{dx^2}$ $= \frac{m\omega^2 x^2}{2}$

Коль скоро $V(x)$ не зависит от времени, то:

$$H\Psi = \left(-\frac{1}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{k}{2}x^2\right)\Psi(x) = E\Psi(x)$$

при $x \to \pm\infty$: $V(x) \to \infty$: $\Psi(x) \to 0$

Учитывая гранич. усл: $\Psi(\pm\infty) = 0$

и Ψ почти всюду огранич.

Реш. ур. ищется в виде $\Psi = P(x)e^{-\frac{(\sqrt{km}\,x)^2}{2}}$, где $P(x)$ – некотор. функц.

А в итоге, обозначая $y = \sqrt{km}\,x$ $H_n = (-1)^n e^{\frac{y^2}{2}}\frac{d^n}{dy^n}(e^{-y^2})$

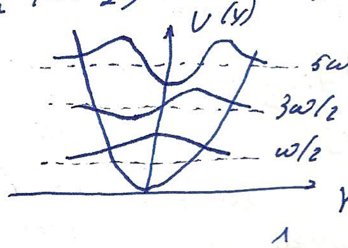
$\Psi_n = H_n(y)e^{-\frac{y^2}{2}}$ $(n = 0, 1, 2, \dots)$, где $H_n(y)$ – полинома Эрмита

$\Psi_0 = A_0 e^{-y^2/2}$

$\Psi_1 = A_1 e^{-y^2/2}$

$\Psi_2 = A_2(2y^2 - 1)e^{-y^2/2}$

энерг. гарм. осц. $\to$ $E_n = \frac{km}{n}\left(n + \frac{1}{2}\right) = \omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$



(8) • Коммут. соотношения для $\hat{L}_i$:

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

• Собств. знач $\hat{L}_z$ из $\hat{L}_z Y(\theta, \varphi) = -i\hbar\frac{\partial Y}{\partial \varphi} = L_z Y$: $L_z = \hbar m$

$\hat{L}^2$ из $\hat{L}^2 Y(\theta, \varphi) = -\hbar^2\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}\right\} = \lambda Y$: $\lambda = \hbar^2 l(l+1)$

где $l = 0, 1, 2 \dots$

• Сложение моментов : $L^2 = (L_1 + L_2)^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_1L_2 + L_2L_1$

$L_\alpha = L_{1\alpha} + L_{2\alpha}$ $(\alpha = x, y, z)$

$L_{i\alpha}$ $(i = 1, 2)$ действует только на функцию i-ую

Например $L_z\Psi_1\Psi_2 = (L_{1z}\Psi_1)\Psi_2 + \Psi_1(L_{2z}\Psi_2) = (m_1 + m_2)\Psi_1\Psi_2$

• Жесткий ротатор – частица, движ. по сфере заданного радиуса $r = a = const$

Примером может быть двухатомн. молекула, атомы которой на неизмен. расстоянии a друг от друга

- Момент инерции: $I = Ma^2$
- Гамильтониан ротатора: $\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2I}$
- Ур. Шред. для ротатора: $\frac{\hat{L}^2}{2I}\Psi = E\Psi$ $\to$ Откуда ур. энергии ротатора $E = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I}$

собств. функц рот $\Psi_{lm} = Y_{lm}(\theta, \varphi)$

где $l = 0, 1, 2 \dots$

$m = l, \dots, -l$

• Матричное представление операторов углового момента

Если множество функций Ψ_i, то

можно вычислить $A_{ij} = \langle\Psi_i|A|\Psi_j\rangle$

матричн. элемент оператора A

Эти числа могут быть сост. в матрицу

$$\boxed{L_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad L_x = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} \quad L_y = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}}$$

Так $\langle\Psi_{lm_i}|L^2|\Psi_{lm_j}\rangle = l(l+1)\langle\Psi_{l,m_i}|\Psi_{l,m_j}\rangle = l(l+1)\delta_{ij}$ $\to$ матрица с "0" кроме диагонали: $l(l+1)$ – одно число

или $\langle\Psi_{lm_i}|L_z|\Psi_{lm_j}\rangle = m_j\langle\Psi_{lm_i}|\Psi_{l,m_j}\rangle = m_j\delta_{ij}$ $\to$ матрица с "0" кроме диагонали: весь набор чисел от l до $-l$

9 —

10

10 11 → +

12 Точное реш. ур. Шредингера возможно только для некоторых простых систем
В др. случ. примен. приближ. методы, например Теория возмущений
Она исп. в тех случ., когда отклонение от системы допуск. точное решение можно представить в виде маленьк добавки к гамильтониану невозм. системы:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$$

гамильт. идеал. задачи

добавка (возмущение)

Нестац. теория рассматр. системы, в кот оператор возмущ. явно зависит от времени

Стац. теория — // — не зависит от времени

Если известн. точное реш: $\hat{H}_0 \Psi_n^0 = E_n^0 \Psi_n^0$
То реш. задачи теор. возмущ: опред. энергии и волн. функц. полного $\hat{H}$ через известн E_n^0 и Ψ_n^0

- Если $\hat{V}$ мало, то E_n и Ψ_n оператора $\hat{H}$ мало отлич. от E_n^0 и Ψ_n^0 оператора $\hat{H}_0$
Тогда реш. возмущ. ур. Шред. ищут в виде:

$$E_n = E_n^0 + E_n^1 + \ldots = \sum_{k=0}^{\infty} E_n^{(k)}$$

$$\Psi_n = \Psi_n^0 + \Psi_n^1 + \ldots = \sum_{k=0}^{\infty} \Psi_n^{(k)}$$

где E_n^1, Ψ_n^1 - поправки того же порядка малости что и $\hat{V}$
E_n^2, Ψ_n^2 — поправки, квадратичные по возмущ.
Усл. применимости: $|V_{nm}| \ll |E_n^0 - E_m^0|$ при $n \neq m$

- когда энерг. уровни вырождены волн. функц. уже в нулевом нул. приближении необх искать в виде лин. комбинации невозмущ. волн. функц:

$$\Psi^0 = \sum_{m=1}^{g} C_m \Psi_m^0$$, где g - кратность вырождения ур. E_m^0

Ψ_m^0 - волн. функц. для невозмущ. и ортонормир. $\int \Psi_k^0(\xi)\Psi_m^0(\xi)d\xi = \delta_{km}$

Тогда $(\hat{H}_0 + \hat{V})\Psi^0 = E\Psi^0$ и

$$\sum_{m=1}^{g} [(E_m^0 - E)\delta_{km} + V_{km}]C_m = 0, \quad k = 1, 2, g$$

$$V_{km} = \int \Psi_k^0 \hat{V} \Psi_m^0 d\xi$$

Решения будут нетривиальн при $\det\|(E_m^0 - E)\delta_{km} + V_{km}\| = 0$

и они будут набором C_m

а $\sum_{m=1}^{g} |C_m|^2 = 1$ ← нормируя, получим правильн. функции нулевого приближения.

Для вырожд если в матрице оператора возмущ. недиагон. элементы доминируют.

Эффект Штарка заключающийся в расщеплении ~~первого~~ возбужд. энерг. ур. ~~~~ ~~~~ ~~атома~~ атома ~~водорода~~ в однородн. эл. поле ~~напряженности E~~.

Для ат. водорода → из четырех вырожденных состояний, соответств $n=2$, два сост вообще не изм. а два других приобретают добавочн. энергию $E_{1,2} = \pm 3eEa_0$

Эффект Зеемана заключается в расщепл. энерг. ур. атомов во внешн. постоян. магн. поле.

Простой эф. Зеемана – частица без спина и совокупность расщепл. в магн. поле спектр. линий – триплет или дублет

Аномальн. эф. Зеемана – сущ. спина электрона приводит к числу расщепл. линий > 3

(11) • Для вычисления первых дискретных уровней энергии квант. систем иногда удобно воспольз. вариац. методом:

$$E_0 \leq \int \psi^* \hat{H} \psi \, dq$$

энерг. осн. сост квант. сист.

Определен. энергии осн. состоян. сводится к нахожд. min $\int \psi^* \hat{H} \psi \, dq$ на опр. классе функций ψ.

1) Выбирается нормированная ψ зависящ. от α, β и др. параметров
ψ – непрерывна, огранич, однозначна
2) Рассчитывается $J(\alpha, \beta, \ldots) = \int \psi^* \hat{H} \psi \, dq$
3) Определяются параметры α_0, β_0, при которых J минимально
4) $E_0 = J(\alpha_0, \beta_0, \ldots)$

Метод Ритца

• Часто ψ выбирают в виде лин. комбинации некотор. известн. функций χ_k $(k = 1, 2, \ldots, n)$ отвеч. конкретн. физ. задаче

$$\psi = \sum_{k=1}^{n} c_k \chi_k$$, где меняться могут только c_k

Функционал энергии:

$$I(\psi) = \langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_{k,\ell=1}^{n} c_k^* c_\ell \underbrace{\langle \chi_k | H | \chi_\ell \rangle}_{\text{можно вычислить}}$$

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = \sum_{k,\ell=1}^{n} c_k^* c_\ell \underbrace{\langle \chi | \chi \rangle}_{\text{можно вычислить}}$$

Далее ищется экстремум $I(\psi)$ после нахождения c_i

(13) Пусть на сист. действ. слабое возмущ., меняющ. во времени $\hat{V}(r,t)$

$\underbrace{E_n^{(0)} \text{ и } \Psi_n^{(0)}}$ для $\hat{H}_0(r)$ известны

решен. $\hat{H}_0\Psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\Psi_n^{(0)}$

Задача: в приближ. вычисл. $\Psi(r,t)$ нестац. ур. Шред:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi = \hat{H}_0\Psi + \hat{V}(r,t)\Psi$$

по $\forall\,\Psi_n^{0}(r)$ невозмущ. сист.

Для этого разложим $\Psi(r,t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n(t)\Psi_n^{(0)}(r)e^{-i\omega_n t}$, где $\omega_n = \frac{E_n^{(0)}}{\hbar}$

Подставляя $\Psi(r,t)$ в нестац. ур. Шредингер.,
и учитывая $\hat{H}_0\Psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\Psi_n^{(0)}$ и $\hbar\omega_n = E_n^{(0)}$

$$i\hbar\sum_{n=0}^{\infty}\frac{da_n}{dt}\Psi_n^{(0)}(r)e^{-i\omega_n t} = \sum_{n=0}^{\infty}a_n\hat{V}(r,t)\Psi_n^{(0)}(r)e^{-i\omega_n t}$$

Умножив на $\Psi_m^{(0)*}\cdot e^{i\omega_m t}$ и проинт. $\int_{-\infty}^{\infty}$

$$i\hbar\frac{da_m}{dt} = \sum_{n=0}^{\infty}a_n(t)V_{mn}(t)e^{-i\omega_{nm}t}$$

где $V_{nm}(t) = \langle m|\hat{V}(r,t)|n\rangle$, а $\omega_{nm} = \frac{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}{\hbar}$

$a_m = a_m^{(0)} + a_m^{(1)} + \ldots$ – разложение по степени малости

(14) Для эл. поля постоянного векторн. потенц. $A=0$

$E_0 = -\mathrm{grad}\,\varphi$, где φ – скалярн. потенц.

$\varphi = -E_0 r$

Тогда оператор гамильт. для эл. поля $H = -\frac{1}{2m}\Delta - qE_0\cdot r + V(r)$

потенц. взаим. с др. полями

Так для $\bar{e}$ в атоме H, принимая направл E_0 за ось z:

$$H = -\frac{1}{2}\Delta - \frac{1}{r} + E_{0z}z$$

Для постоян. маг. поля: $E=0$ и $\frac{\partial A}{\partial t} = -c\,\mathrm{grad}\,\varphi$, но в виду постоянност поля A и φ не завис. от t

$\mathrm{grad}\,\varphi = 0$

Так $\varphi = \mathrm{const}$ (например можно положить $=0$)
при этом все ур. энергии всего лишь сдвинутся на эту величину

но $A = \frac{1}{2}B_0\cdot r$ так же из чего, выбрав напр. B_0 за z

$$H = \underbrace{\left(-\frac{1}{2m}\Delta + V(r)\right)}_{\text{не зависит от поля}} - \frac{q}{2mc}L_z B_{0z}$$

Магнитн. дипольн момент $\mu = \frac{q}{2mc}L = \mu$

Эл. дипольный момент $d = qr$

(15) У микрочастицы есть внутр. степень свободы, которой приписывают собств. момент импульса микрочастицы — спин.

вектор — как и L измер. в ед. $\hbar$

Оператор спина — $\hat{S}$. Коммут. соотношения с $\hat{S}$ такие же как $\hat{L}$, например $[\hat{S}^2, S_z] = 0$

$\boxed{\hat{S} = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}, \text{ где } \hat{\sigma}\text{ - вектор}}$

Но $\hat{S}$ действ. на "особые" спиновые переменные σ

$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ — матриц. Паули

$\Psi(r, \sigma) = \varphi(r) \chi(\sigma)$

$\varphi(r)$ — координатн. волн. функция; $\chi(\sigma)$ — спиновая волн. функц.

Собств. знач. $\hat{S}^2 = \hbar^2 s(s+1)$, где $s = -900, \dots, -1, 0, 1, 65000, \dots$

Собств. знач. $\hat{S}_z = \hbar m_s$, где $m_s = s, \dots, -s$ — магнитное спиновое квантовое число

Так для $\bar{e} \to s = \frac{1}{2}$, а $m_s = \pm\frac{1}{2}$

p, n

• Для системы частиц спин вводится согласно равенству: $S = \sum_i S_i$ при этом каждый из операторов должен действ. только на ту спин. функц, котор. связ. с i частиц.

Сложение спинов

(16) Молекул. системы включают некоторое число тожеств. частиц. Оператор Гамильт. не меняется при перестановке в нем индексов тожд. частиц. Таким образом группа перестановок S_n каждой ~~сист.~~ тожд. частиц есть подсистемы группа ур. Шред. для всей системы.

— Волн. функц. должны преобразов. по полносимметричн. представлению, т.е. оставаться без измен., если тожд. частицы имеют целый спин (бозоны — индийск. физик Бозе)

— Волн. функц. должны преобр. по антисимметричн. представл., т.е. менять знак при тожд. перестановке индексов 2-ух частиц, если тожд. частицы имеют полуцелый спин (фермионы — итальянск. физик Ферми)

Пример N_2H_4 — $18\bar{e}$ $(s = \frac{1}{2})$, $4p$ $(s = \frac{1}{2})$ и 2 ядра N $(s = 1)$

Волн. функц. антисим. при перест. индексов $\bar{e}$ и p и симметричн. при перест. индексов ядер N

(10) Угл. часть волн. функц. в случ. центр. поле задается шаровыми функц. $Y_{lm}(\Theta, \varphi)$

Решение ур. Шр. можно искать в виде:

$\Psi(r, \Theta, \varphi) = R(r)\, Y_{lm}(\Theta, \varphi)$

$R(r)$ — рад. волн функц; Y_{lm} — шаров. волн. функц

$R(r)$ определяется видом потенц. энергии $U(r)$

Если $U(r)$ везде конечна, то и $R(r)$ имеет конечн. знач. $r \in [0, \infty]$

Зависимость волн. функц от сферич. углов не связана с конкретным выбором вида потенц. энергии $U(r)$

(17) Эл. конфигурация   Каждый детерминант соответствует заданному множеству орбиталей из набора $\varphi_1, \dots, \varphi_i$ с указанием их чисел заполнения. Задание совокупности занятых орбиталей и чисел заполн. опред эл. конфигурацию.

Например для Че можно построить определитель, отвечающий конфиг. $(\varphi_1)^{2}(\varphi_2)^{2}$. А конфиг. $(\varphi_1)^2(\varphi_2)^1(\varphi_3)^1$ соотв. 4 детерминанта

числа заполн.

т.к. ~~...~~ орбит. φ_2 и φ_3 могут входить в детерминант либо с множителем α, либо β.

Правило Хунда – при прочих равных условиях для одной эл. конфиг. состояние с более высокой мультиплетностью будет лежать по энергии ниже. Нет строгого док-ва, опирается на качеств. рассужд...

Волновые функц. построенные ~~по правилу~~ согласно правилу Хунда являются приближен. Их особенность – они собствен. для операторов полного углового момента L и полного спина S многоэлектр. системы. Т.е. эти функции построены в приближении LS-связи, или связи Рэссела-Саундерса.