Владислав Викторович Курин, ИПФ РАН, 67-51-85 раб.

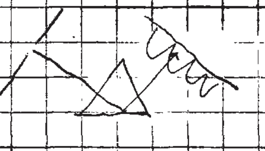
kurin @ ipm. sci-nnov. ru

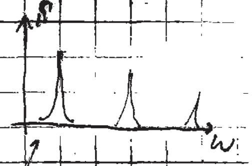
Страница: htt:// ipm. sci-nnov ru/~kurin

① Исторический обзор и физ. мотивация возникновения кв. мех.

1850г - экспериментальная наука о в-ве → Спектры излучения атомов

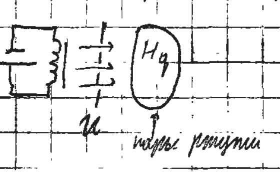
1926г. - появление квантовой механики

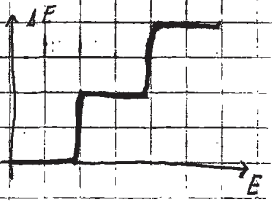




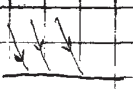
■ Не любые частоты возможны

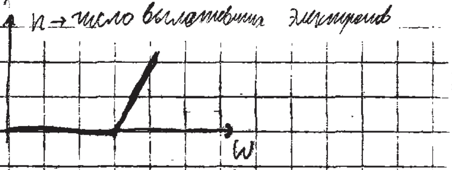
■ Опыты Франка - Герца





■ Фотоэффект.



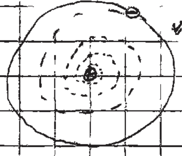


② Классическая физика (неквантовая физика)

а) Классическая механика. (Ньютон, Лагранж, Гамильтон)
б) Классическая теория поля (Максвел: $\vec{F} = q\vec{E}$)

[illegible] - электроны
1900г - ядра

Модель Резерфорда:



Из уравнений Максвелла следует, что любой ускоренно движущийся заряд излучает.

phenomen - явление
phenomena - явления } Квантовая физика. 1900 Планк, Бор.

③ Дискретность в классической физике.

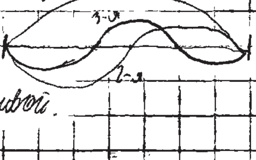
Собственные частоты } Де Бройль 1924г.
Собственные ф-ции } Шредингер 1926г.

Рассмотрим уравнение струны.

производные

$$u_{tt} - c^2 u_{xx} = 0 \leftarrow$$ уравнение Ньютона для кусочка струны

Г.У. $u(x,t)\big|_{x=0,l} = 0$



$$u = T(t) \cdot X(x)$$

1) $\ddot{T} + \omega^2 T = 0$

2) $X_{xx} + \frac{\omega^2}{c^2} X(x) = 0$

$X(x) = C_1 \sin\frac{\omega}{c}x + C_2 \cos\frac{\omega}{c}(x)$

$X(0) = 0 = C_2$

$X(l) = C_1 \sin\frac{\omega}{c} l = 0 \to \frac{\omega}{c} l = \pi n,\ n \in N$

$\omega = \frac{\pi n}{l} c$

Де Бройль:

! Динамика микромира должна быть волновой.
Необходимость ψ

④ История взаимоотношений волн и частиц.

Ньютон: свет - корпускулы.
Гюйгенс: свет - волна → дифракция, интерференция } волновая оптика ⟷ Волновая (квантовая) механика

волновая оптика ↓ геометрическая оптика; Волновая (квантовая) механика ↓ Классич. механика

Гамильтон → геометрическая оптика при $\lambda \to 0$ ∽ Классич. механика

- преломление
- отражение
- принцип Ферма → оптическая длина пути минимальна

!!! Волновая должна пох
в таком п
пошении с
~~оптикой~~ как
класс мех
волновая
с геометри
оптикой.

~~Механика~~

~~Классич. механика~~

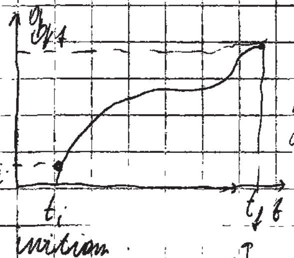
⑤ Краткий курс класс. механики

① Принцип наименьшего действия: $S = \int_{t_i}^{t_f} \mathcal{L}(q, \dot q t) dt$

ф-л от реализации

$q(t_i) = q_i$

$q(t_f) = q_f$



Совокупно
координат
системы о
конфигура
пр.-во.

$$\delta S = \int \left(\frac{\partial L}{\partial q} \delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot q} \delta \dot q\right) dt = 0$$

$$\delta q = q_1(t) - q_2(t)$$

$$\delta S = \int \boxed{\frac{\delta S}{\delta q}} \delta q \, dt$$

← вариационная производная, но $\frac{\partial L}{\partial \dot q} \delta \dot q = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot q} \delta q - \delta q \cdot \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot q}$

$$\delta S = \underbrace{\frac{\partial L}{\partial \dot q} \delta q \Big|_{t_i}^{t_f}}_{0} + \int_{t_i}^{t_f} \left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \cdot \frac{\partial L}{\partial \dot q}\right) \delta q \cdot dt = 0$$

↓

$\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \cdot \frac{\partial L}{\partial \dot q} = 0$ - ур-ние Лагранжа

$p = \frac{\partial L}{\partial \dot q}$ - импульс.

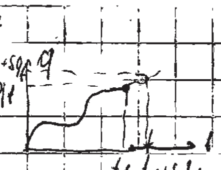
$$\dot p = \frac{\partial L}{\partial q} = F$$

② Рассмотрим действие как ф-цию координат.

$$\delta S = \frac{\partial L}{\partial \dot q} \delta q \Big|_{t_i}^{t_f} + \int_{t_i}^{t_f} \left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \cdot \frac{\partial L}{\partial \dot q}\right) \delta q \, dt$$

$S = S(\underset{(q, t)}{q_f, t_f}; \underset{\text{фиксир}}{q_i, t_i}) = S(q, t)$, $\boxed{\frac{\partial S}{\partial q(t)} = \frac{\partial L}{\partial \dot q} = p}$

$S = \int L dt$



$\frac{dS}{dt} = L$

$\frac{dS}{dt} = \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial S}{\partial q_f} \cdot \frac{\partial q_f}{\partial t} = L$

m. $S = \int_{t_i}^{t_f} L dt = \int (p \overset{\dot q dt}{dq} - H dt) = \int (p \dot q - H) dt.$

$dS = p dq - H dt$

$\boxed{\frac{dS}{dt} = \frac{dS}{dt} + p \cdot \dot q = L - p \cdot \dot q = -}$

Уравнение Гамильтона-Якоби: Пусть $H(p,q)$ – известно, тогда.

$$\boxed{\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(\frac{\partial S}{\partial q}, q\right) = 0}$$

Классическая механика должна быть предельным случаем квантовой механики.

$\boxed{\text{Геом. оптика}} \rightarrow \boxed{\text{класс. мех}}$

S, $\frac{\partial S}{\partial t} = -H$, $H = E$

$\nabla S = \vec{p}$, если $\vec{p} = const$ и $E = const$, то

$S = \vec{p} \cdot \vec{r} - Et$

⑥ Волновая оптика

1) $\operatorname{rot} \vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$

2) $\operatorname{rot} \vec{B} = \frac{4\pi}{c}\vec{j} + \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$

3) $\operatorname{div} \vec{E} = 4\pi\rho$

4) $\operatorname{div} \vec{B} = 0$

Трёхвекторная форма ур-ний Максвелла.

исключили $\vec{B}$ из 1)

$$\rightarrow \boxed{\operatorname{rot}(\operatorname{rot}\vec{E}) + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = -\frac{4\pi}{c}\frac{\partial \vec{j}}{\partial t}}$$

Аналогичные уравнения можно получить для любых компонент векторов.

$\vec{j} = \vec{j}_{поляр} + \vec{j}_{намаг} + \vec{j}_{пров.}$

ток поляризации, ток намагничения, ток проводимости.

Если введем $\vec{B} = \vec{H} + \frac{4\pi}{c}\vec{M}$

$\vec{D} = \vec{E} + 4\pi\vec{P}$

$\frac{\partial \rho_{св}}{\partial t} + \operatorname{div}\vec{j}_{пров} = 0$

$$\operatorname{rot}\operatorname{rot} = \nabla \operatorname{div} - \Delta$$

Рассмотрим поле в вакууме при $\rho = 0$ $\rightarrow \boxed{\Delta\vec{E} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = 0}$ – волновое уравнение

! Уравнения Максвелла в среде (неоднородной). пусть $\varepsilon = \varepsilon(\vec{r})$

$\mu = 1 \rightarrow \vec{B} = \vec{H}$

$\operatorname{rot}\vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$

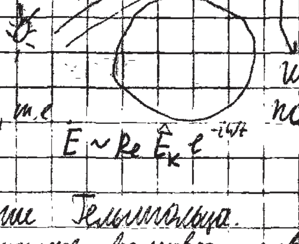
$\operatorname{rot}\vec{B} = \frac{1}{c}\frac{\partial \varepsilon E}{\partial t}$

Положим $j_{пров} = j_{намаг} = 0$

$\vec{D} = \varepsilon\vec{E}$

Пусть $\varepsilon = const$ во времени, тогда $\boxed{\Delta\vec{E} - \varepsilon\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\vec{E}}{\partial t^2} = 0}$, $\varepsilon = \varepsilon(\vec{r})$

Линейное уравнение.



$\frac{\partial S}{\partial t} + H(\nabla S, q) = 0$

Из этого уравнения получим похожее на.

Будем рассматривать монохроматические процессы, т.е. $E \sim \operatorname{Re}\hat{E}_k e^{-i\omega t}$

Значит для $\hat{E}_k$: $\boxed{\Delta E_k + \varepsilon_{(r)}\frac{\omega^2}{c^2}E_k = 0}$ – уравнение Гельмгольца.
(стационарное волновое уравнение)

Приближение геометрической оптики.

Метод Фурье $E(\vec{r}) = \int E(k)\frac{d^3k}{(2\pi)^3}e^{i\vec{k}\vec{r}}$, где $d^3k = dk_x \cdot dk_y \cdot dk_z$ тройной интеграл

$\vec{k}\cdot\vec{r} = k_x x + k_y y + k_z z$

Пусть $\varepsilon = const$, тогда

$$\int\left[-k^2 + \varepsilon\frac{\omega^2}{c^2}\right]E(k)\frac{d^3k}{(2\pi)^3}e^{i\vec{k}\vec{r}} = 0$$

т. к. $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ – полная система ортогональн. ф-ций, то при $E(k) \neq 0$

$$\boxed{k^2 = \frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon} \text{ – дисперсионное уравнение}$$

Решение стац. волнового уравнения:

$$E = \int E(k)\, e^{-i\omega t + i\vec{k}\vec{r}} \frac{d^3k}{(2\pi)^3}$$

Для свободной частицы

фаза

$$\psi = \vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t \rightarrow \text{аналогично } \vec{p}\cdot\vec{r} - \omega t \equiv S$$

т.е. ω – играет роль энергии, а
$\vec{k}$ – роль импульса.

Фаза волны ~ действию, т.е. возникает аналогия
фаза – действие

$$\boxed{S = \hbar\psi} \text{ где } \hbar \text{ – постоянная Планка.}$$

$\vec{p} = \hbar\vec{k}$

$E = \hbar\omega$

Как построить приближенное решение волнового уравнения для плавной меняющ. среды

Уравнение $\Delta E + \frac{\omega^2}{c}\varepsilon(r)E = 0$

1) При $\varepsilon = const$, $E \sim e^{i\vec{k}\vec{r}}$ $\quad k^2 = \frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon$

2) Если ε – меняется плавно, то на $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ – ε меняется мало, т.е.

$$\Delta\varepsilon = \nabla\varepsilon \cdot d\vec{r}, \text{ т.е.}$$

$$\lambda\nabla\varepsilon \ll \varepsilon \quad \text{более точно } \frac{\partial\lambda}{\partial x}\lambda \ll \lambda$$

$$\psi = \int \vec{k}(r)\, d\vec{r} \text{ – интеграл вдоль кривой.}$$

Будем искать решение в виде $E = a e^{i\psi}$

$$\nabla(a e^{i\psi}) = \nabla a \cdot e^{i\psi} + ai(\nabla\psi)e^{i\psi}$$

$$\Delta(a e^{i\psi}) = e^{i\psi}(\Delta a + 2i\nabla a\nabla\psi + ia\Delta\psi - a(\nabla\psi)$$

Отсюда получаем
$$\begin{cases} \Delta a - a(\nabla\psi)^2 + \frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon a = 0 \\ 2\nabla a\nabla\psi + a\Delta\psi = 0 \end{cases}$$

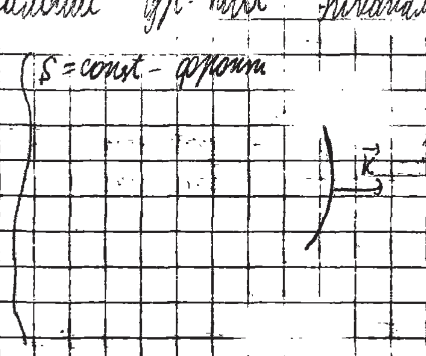
Пренебрегаем членом $\frac{\Delta a}{a} \ll (\nabla\psi)^2$ [illegible]

Уравнение Эйконала → $\nabla\psi^2 = \frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon(\vec{r})$

Уравнение переноса $\operatorname{div}(a^2\nabla\psi) = 0$

Случай стационарной среды

Аналогия ур-ния Эйконала с $H(\nabla S) = E = const$



Этот подход
эквивалентен теории
Гамильтона – Якоби.

$\boxed{\text{Список аналогий}}$

Оптика	Механика
~~Эйконал~~, ψ	S
$\vec{K}$	$\vec{p}$
ω	E
Уравнение Эйконала	Уравнение Гамильтона - Якоби
$\lambda \to 0$ $k \to \infty$ $(k >> k_{хар} = \frac{\nabla\varepsilon}{\varepsilon})$	$p = \hbar k$, , формальный переход при $\hbar \to 0$
$E = \frac{p^2}{2m}$ Дисперсионное уравнение	$E = \frac{p^2}{2m}$ – Энергия - импульс

по $\boxed{\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}$ → восстановим:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi$$

$\vec{E} \sim -i\nabla$

Уравнение Гамильтона - Якоби в классич. ф-ке

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(\frac{\partial S}{\partial q}, q\right) = 0$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r})$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + U(\vec{r}) = 0$$

Если в H время t явно не входит, то

$$S = -Et + S(\vec{r}) \to \underline{E = \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + U(\vec{r})}$$

$\boxed{i\hbar\dot{\Psi} = \hat{H}\Psi}$ – уравнение Шрёдингера, где

$\hat{H}$ – оператор Гамильтона, где $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U$

Задача о свободном движении воспроизводит связь между E и p $(U(\vec{r}) = 0)$

$$\psi = \underset{const}{A} e^{-i\omega t + i\vec{k}\vec{r}}$$

$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ – дисперсия такая же, как в класс. волн. механике.

$\Psi = (E_x, \ldots B_x)$

$\Delta\Psi + \frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon\Psi = 0$ – волновое уравнение.

$\Psi = a e^{i\psi}$

$$\begin{cases} \frac{\Delta a}{a} + (\nabla\psi)^2 + \frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon = 0 \\ \operatorname{div}(a^2\nabla\psi) = 0 \end{cases}$$

$a\left[(\nabla\psi)^2 + \frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon\right]e^{i\psi} = 0$

Если $\frac{\Delta a}{a} \ll 1$, то

$\underline{-(\nabla\psi)^2 + \frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon = 0}$ – уравнение Эйконала для геом. оптики

← аналогия (прямая)

Перейдём к классич. пределу в ур-нии Шрёдингера

Для стационарного случая вид решения → $e^{i\omega t}\psi(r)$, где $\psi(r)$ удовлетворяет

$$\text{или} \begin{cases} \hbar\omega\psi(r) = \hat{H}\psi \\ E\psi(r) = \hat{H}\psi(r) \end{cases}$$

$\hat{H} = -\frac{\hbar^2\Delta}{2m} + U$

т. о. $\Delta(ae^{i\psi}) \to -(\nabla\psi)^2 a e^{i\psi}$ 2 (эквивалентно

$$\begin{cases} \Delta\Psi + \frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon\Psi = 0 \\ \Psi = ae^{i\psi} \end{cases}$$

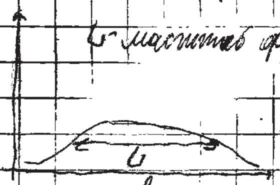
$\nabla a e^{i\psi} = (\nabla a + ia\nabla\psi)e^{i\psi}$ 3

$\nabla\nabla a e^{i\psi} = [\Delta a + 2ia\Delta\psi + ia\Delta\psi - a(\nabla\psi)^2]e^{i\psi}$ – ур-ние геом. оптики

Какие выводы можно сделать отсюда?

Переход к классической механике: $a e^{\frac{i}{\hbar} S}$ когда $\frac{S}{\hbar}$ - большая фаза, α

∇S - плавная ф-ция



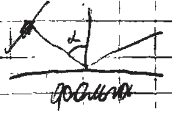
L- масштаб функции

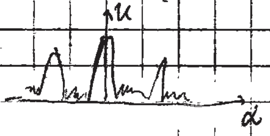
$L \sim \frac{f}{\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)}$

① Появление волновой ф-ции

② Появление ур-ния Шрёдингера ← можно

Опыты по дифракции эл-нов.





③ Принцип суперпозиции

Ψ_1, Ψ_2 - решение ур-ние ~~[illegible]~~ Шредингера.
тогда $\alpha_1\Psi_1 + \alpha_2\Psi_2$ - тоже решение ур-ния Шредингера
$\alpha_1, \alpha_2 = const$

L > величины характеризующей нашу задачу.
т.е. $\frac{\partial k}{\partial l} < k^2$ - плавно
$(\Delta S$ - плавная ф-ция$)$

④ Физическая величина становится **оператором**

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

В квантовой механике каждой соответствующей величине ставится в соответствии операторы.

$$-i\omega \rightleftarrows \frac{\partial}{\partial t}$$

$$i\vec{k} \rightleftarrows \nabla$$

Оператор - правило по которому одной функции из области определения ставится ф-ция из области значения

Операторы: $f(x) \to g(x)$ $\quad 1 \cdot f(x) = f$

$\frac{d}{dx} f(x) = f'(x)$
← самостоятельная жизнь

$$\nabla\left(a e^{i\frac{S}{\hbar}}\right) \to \left(\frac{i}{\hbar} \nabla S\right) a e^{\frac{iS}{\hbar}}$$

$$p \to -i\hbar\nabla = \hat{p}$$

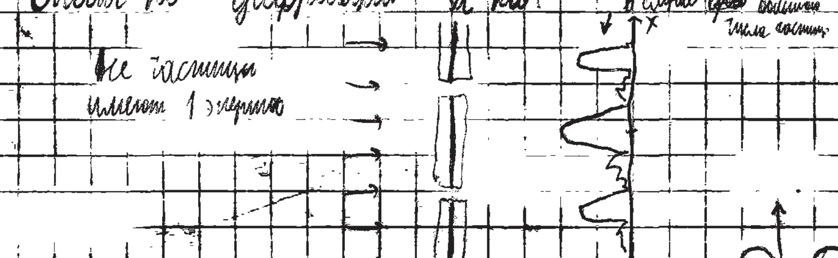
$$H \to \hat{H}$$

⑤ Измерение в квантовой механике

⑥ Смысл волновой ф-ции Ψ.

На эти вопросы нам придется ответить.

Опыт по дифракции эл-нов:

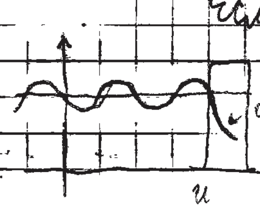


$i\hbar\Psi = \left(-\frac{\hbar^2\Delta}{2m} + U\right)\Psi$, U = const

$-\left(\frac{\hbar^2\Delta}{2m}\right)\Psi = (E-U)\Psi$

Если решение в виде $e^{i\vec{k}\vec{r}}$

$k^2 = (E-U)\frac{2m}{\hbar^2}$



спадание по экспоненте $k = \sqrt{(E-U)\frac{2m}{\hbar^2}}$

Нельзя Ψ придать классический смысл типа напряженности электр. поля.

! $|\Psi_{(x)}|^2$ – плотности ~~плотность~~ вероятности нахождения электрона в интервале от x до x+

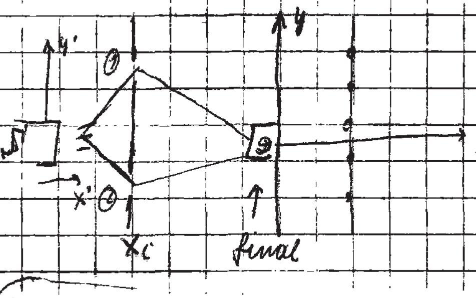
← плотность вероятности

$\Psi(x)$ – амплитуда вероятности

Квантовая механика носит статистический характер

! В класс. механике: $P(x) = P_1(x) + P_2(x)$

О В квантовой механике $\Psi(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x)$ – вероятности не складываются.



$\vec{r} = (x, y, z)$

$i\hbar\dot{\Psi} = H\Psi \qquad \hbar\omega = E$

$\Psi = e^{-i\omega t}\Psi$, тогда

} задача дифракции с т.зр. зрения волнового уравнения.

$\hbar\omega\Psi = \hat{H}\Psi$ – уравнение Гельмгольца

Из принципа суперпозиции следует з-н сложения амплитуд.

!
1) $\Psi_{1(x)} \rightarrow |\Psi_1|^2$ - вероятности
2) $\Psi_2(x) \rightarrow |\Psi_2|^2$ - вероятности
3) $\Psi(x) = \Psi_1(x) + \Psi_2(x)$

$$|\Psi(x)|^2 = |\Psi_1 + \Psi_2|^2 \neq |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2$$

Пусть амплитуда в-ны вероятн., проходящей через ① и ② будет равна Ψ_1 и Ψ_2 соотв.

$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$

$\langle D|S\rangle_{(y, \cancel{y', x', x})}$ – амплитуда перехода из S в D. – ф-ция Грина.

$G(x, y, x', y')$ – ф-ция Грина – решение ~~$\hbar\omega\Psi$~~ уравнения $i\hbar\dot{\Psi} = H\Psi$, которая при $t=0$ удовлетворяет $\Psi(r, t=0) = \delta(r - r')$

Обозначение, придуманное Дираком

$\langle D|S\rangle = \langle D|S\rangle_{\text{через }1} + \langle D|S\rangle_{\text{через }2} =$

$= \langle D|1\rangle\langle 1|S\rangle + \langle D|2\rangle\langle 2|S\rangle$

i = intermediate

Если дырок ~~бесконечно~~ много, то ! $\boxed{\langle P|S\rangle = \sum_i \langle D|i\rangle\langle i|S\rangle}$ – принцип ~~Гю~~ Гюйгенса Френеля

В сплошном случае следует интегрировать:

На классическом языке $\boxed{G(r, r'') = \int G(r, r')\, G(r', r'')\, d^3r'}$

Средние значения.

(Давыдов „Квантовая механика")

$\langle x \rangle = \overline{x} = \int x |\psi|^2 dx$ $\qquad \langle U \rangle = \overline{U(x)} = \int U(x) |\psi(x)|^2 dx$

$\langle x^n \rangle = \overline{x^n} = \int x^n |\psi|^2 dx$

1) Среднее значение импульса. $\nabla S = p$, $\nabla \varphi$ $\left\} \begin{array}{l} \psi = a e^{i \frac{S}{\hbar}} \to i\hbar \nabla \\ a e^{i\varphi} \to -i\nabla \end{array} \right.$

Рассмотрим свободное движение частицы.

$\frac{\partial U}{\partial t} = D \Delta U$ - ур-ние диффузии.

$\psi = e^{-i\omega t + i \vec{k}\cdot\vec{r}}$

$i\hbar \dot{\psi} = -\frac{\hbar^2 \Delta\psi}{2m}$ $\qquad \hbar\omega_{(k)} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ - дисперсионное ур-ние

Подразумевали соотношения де Бройля
$\hbar\omega = E$
$\hbar \vec{k} = p$
$\hbar \varphi = S$

Пусть при $t=0$

$\Psi(\vec{r}, t=0) = \Psi_0(\vec{r})$, тогда $\Psi = e^{-i\omega_{(k)} t + i\vec{k}\vec{r}}$ - решение

Тогда в силу принципа суперпозиции:

$\Psi = \int \Psi(\vec{k}) e^{-i\omega(k) t + i\vec{k}\vec{r}} \frac{d^3k}{(2\pi)^3}$ - Фурье-преобразование. $\vec{k}$ - волновой вектор.

$i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial z^2}\right)$

Значит $\boxed{\Psi_0(\vec{r}) = \int \Psi(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \frac{d^3 n}{(2\pi)^3}}$ ← данное преобразование Фурье: разложение ф-ции $\Psi_0(\vec{r})$ по собственным ф-циям оператора импульса.

$\boxed{\begin{array}{l} \text{Операторы } \hat{k} = -i\nabla \\ \hat{p} = -i\hbar\nabla \end{array}}$

$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ - собственная ф-ция оператора $\hat{k}$:

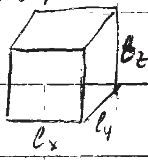
$\hat{k}\Psi = k\Psi$

$-i\nabla\Psi = k\Psi$ $\qquad \Psi_k = e^{i\vec{k}\vec{r}}$ - непрерывный спектр $\vec{k}$.

Ψ_k

Спектр операторов может быть бесконечным в случае задач на всей прямой.

Рассмотрим:



Значит $\Psi(x,y,z) = \Psi(x+\ell_x, y, z) + \Psi(x, y+\ell_y, z) + \ldots$ ← периодические граничные условия

тогда $e^{ikx} = e^{ik(x+\ell_x)}$, $e^{ik\ell_x} = 1$

или $k_x \ell_x = 2\pi n_x$

$k_x = \frac{2\pi}{\ell_x} n_x$, n_x - цел. числа

в случае дискретного спектра $\psi = \sum_{n_x, n_y, n_z} \Psi(n_x, n_y, n_z) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$, $\sum = V \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}$

Т. о. среднее значение координаты импульса:

$\overline{\vec{k}} = \int \vec{k} |\Psi(\vec{k})|^2 \frac{d^3k}{(2\pi)^3}$ $\qquad \overline{k} = \int k |\Psi(k)|^2 \frac{dk}{2\pi}$

$\Psi(x)$ - волновая ф-ция в координатном представлении

$\Psi(k)$ - волновая ф-ция в импульсном представлении.

$\psi(x) = \sum_{k} \psi(k)\ \psi_k(x)$

условие Парсеваля для полноты

$$\int |\psi(x)|^2 d^3x = \int |\psi(k)|^2 \frac{d^3k}{(2\pi)^3}$$

Д-во: $\overline{\vec{k}} = \int \vec{k}\,|\psi(k)|^2 \frac{d^3k}{(2\pi)^3} = \int \psi^*_{(x)}(-i\nabla)\,\psi_{(x)}d^3$

$$\int |\psi(x)|^2 dx = \int |\psi(k)|^2 \frac{dK^3}{(2\pi)^3}$$

$$\left.\begin{aligned}&\int |\psi(x)|^2 dx = \int |\psi(k)|^2 \frac{dK^3}{(2\pi)^3} \\ &\int K\, |\psi(k)|^2 \frac{dK}{(2\pi)^3} = \int \psi^*(x)\,(-i\nabla)\cdot \psi(x)\, dX\end{aligned}\right\} \text{т.о} \quad \bar{A} = \int \psi^*(x)\cdot \hat{A}\psi(x)\,dx$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ix\alpha}\, dx = 2\pi\, \delta(\alpha)$$

e^{ikx} - собств. ф-ции опера-ра импульса.

Св-ва операторов в квантовой механики.

1) $\bar{A}$ - действительные

2) Собственные ф-ции - действительный ОНБ

3) $\hat{A} = \hat{A}^*$ - самосопряжённый оператор (эрмитов) → $(\varphi, A\psi) = (A^+\varphi, \psi)$

$A = A^+$ - самосопрят.

Операторы.

(I) $\hat{A}\psi_n = A_n \psi_n$, $(\psi_n\ \psi_m) = \int \psi_n^*(x)\, \psi_m(x)\, dx = \delta_{mn}$

$\psi_n,\ n\in N$ - собственные ф-ции дискретного спектра.

Разложение волновых ф-ций по базису собств. ф-ций какого-либо оператора

$\psi(x) = \sum_n C_n \psi_n(x)$ - обобщённый ряд Фурье

! $\int \psi_m^*(x)\, \psi(x)\, dx = C_m$ → Подставим в разложение ф-ции.

тогда $\psi(x) = \sum_n \psi_n(x) \int \psi_n^*(x')\psi(x')\, dx' = \int \underbrace{\left\{\sum_n \psi_n^*(x')\, \psi_n(x)\right\}}_{f(x,x')} \psi(x')\, dx'$

т.е. $\psi(x) = \int f(x,x')\, \psi(x')\, dx \to f(x,x') = \delta(x-x'$

т.е. $\boxed{\delta(x-x') = \sum_n \psi_n^*(x')\cdot \psi_n(x)}$

(II) Рассмотрим оператор с непрерывным спектром

$\hat{A}\psi_A = A\psi_A$ ψ_A - собственная ф-ция.

Посмотрим собственные ф-ции оператора координаты (оператор умножения)!

$\psi(x)$-любая, $\hat{x}$-оператор умножения.

$\hat{X}\,\psi(x) = X\,\psi(x) = \int X'\, \delta(x-x')\, \psi(x')\, dX'$

$X\,\psi_{x_0}(x) = X_0\, \psi_{x_0}(x) \to \psi_{x_0}(x) = \delta(x-x_0)$

$\Psi(x) = \int \Psi(A)\,\Psi_A(z)\,dA$

Собств. числа операторов, фигурирующие собственные ф-ции этих операторов называются <u>квантовыми числами.</u>

Если $A = K$, то

$\Psi_K = e^{i\vec{k}\vec{x}}$. Отнормируем.

Нормировка волновых ф-ций сплошного спектра (нормируют на δ-ф-цию)

$$\int \Psi_{A'}^*(x)\,\Psi_A(x)\,dX = \delta(A-A')$$

$$\int b^2 e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{x}}\, d^3X = (2\pi)^3\, b^2\, \delta(\vec{k}-\vec{k}')$$ потребуем $b^2\cdot(2\pi)^3 = 1$, т.е.

$\frac{1}{(2\pi)^3}\, e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{x}}$ – нормированные ф-ции

$$\boxed{\begin{aligned}\Psi(x) &= \int \Psi(k)\, e^{ikx}\frac{dk}{\sqrt{2\pi}}\\ \Psi(k) &= \int \Psi(x)\, e^{-ikx}\frac{dX}{\sqrt{2\pi}}\end{aligned}}$$ } Нормированное преобразование Фурье

!!! Но e^{ikx} – собственная ф-ция оператора импульса

$\underline{\hat{K}\,\Psi_k(x) = k\,\Psi_k(x)}$ – собств. ф-ции в X представлении

$\hat{K} = -i\nabla$

$\underline{\hat{X}\,\Psi_x(k) = X\,\Psi_x(k)}$ – собств. ф-ции в K представлении

т.е. $\boxed{\delta(x-x') = \int \Psi_A^*(x')\,\Psi_A(x)\,dA}$

т.е. $$\left.\begin{aligned}\Psi(x) &= \int \Psi(A)\,\Psi_A(x)\,dA\\ \Psi(A) &= \int \Psi(x)\,\Psi_x(A)\,dX\end{aligned}\right\}$$ $\boxed{\Psi_A(x) = \Psi_x^*(A)}$ – разложение по собств. ф-циям – ~~ряд~~ обобщение разложения в ряд или ∫ Фурье.

- есть волновая ф-ция
- операторы физ. величин
- для вычисления среднего следует вычислять средние значения $\bar{A} = \int \Psi^*(x)\,\hat{A}\,\Psi(x)\,dx$

! <u>матрица с непрерывными индексами</u>

⇓

$\boxed{\int \Psi^*(x')A(x',x)\Psi(x)\,dx}\,dx'$ (Матрицы операторов) (~~Ландау~~) (Блохинцев)

$\bar{A} = \int \Psi^*(x)\,\hat{A}\,\Psi(x)\,dx = (*)$ Разложим Ψ по базису собственных ф-ций оператора B.

$\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n$ – энергетическое представление $\rightarrow \Psi = \sum_n C_n\Psi_n(x)$

$$(*) = \sum_{m,n} C_m^* \int \Psi_m^*(x)\,\hat{A}\,\Psi_n(x)\,dX\; C_n = \sum_{m,n} C_m^*\, A_{mn}\, C_n$$

где $A_{mn} = \int \Psi_m^*(x)\,\hat{A}\,\Psi_n(x)\,dx$ – ! <u>матрица оператора A</u>

Обозначения Дирака.

вектор – 1) совокупность чисел (A_x, A_y, A_z), которые при повороте системы координат преобразуются как оси координат x, y, z

2) $\longrightarrow$ – направленный отрезок

! Но вектор существует сам по себе

чных

ket
$|\psi\rangle$ - абстрактный вектор (правый)

$\langle\psi|$ - левый абстрактный вектор
bra
(комплексно-сопряжённый правому)

Скалярное произведение

$$\langle\varphi|\psi\rangle = (\varphi,\psi) = \int \varphi^*(x)\,\psi(x)\,dx = \int \varphi^*(A)\,\psi(A)\,dA$$ - сплошной спектр

$$= \sum_n \varphi_n^*\psi_n$$ - дискретное представление.

Необходимость введения левых и правых векторов:
- для записи скалярного произведения.
- левый вектор – строка
  правый вектор – столбец

bra + ket = braket (скобки)

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \vdots\end{pmatrix} \qquad \langle\psi| = (\psi_1^*, \psi_2^*, \ldots)$$

Введем абстрактные операторы:

$$\hat{A}\,\psi_A(x) = A\,\psi_A(x)$$

$\hat{X}|X\rangle = X|X\rangle$ - аналог задачи на собств. значения

абстр. опер. действует на абстрактный вектор

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

интрисы: ф-ции представления

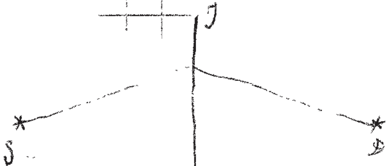
Обозначение $\psi_A(x)$ в дираковских обозначениях.

$\vec{x}_0, \vec{y}_0, \vec{z}_0$ - базис

ф-ции представления ям - в ряд

$A_x = (\vec{x}_0\,\vec{A})$

$$\boxed{\psi(A) = \langle A|\psi\rangle}$$



- Условие нормировки:

$$\int \underset{\langle n,x\rangle}{\psi_n^*(x)}\ \underbrace{\psi_m(x)}_{\langle x|m\rangle}dx = \langle n|m\rangle - \delta_{mn}$$

- Преобразование Фурье:

$$\psi(x) = \int \psi(k)\,\underbrace{\psi_k(x)}_{\langle x|k\rangle}\,dk$$

Прямое
$$\langle x|\psi\rangle = \int\langle x|k\rangle\langle k|\psi\rangle\,dk$$

Обратное
$$\langle k|\psi\rangle = \int\langle k|x\rangle\langle x|\psi\rangle\,dx$$

Лекция 7.

1) ψ

2) $\hat{A}$ $\quad \bar{A} = \int \psi^*\hat{A}\psi\,dV$

а В.

3) $f(x) = |\psi(x)|^2$ – вероятностный смысл волновой функции.

4) $f(p) = ?$ $\quad \psi(x)$ представляется в виде разложения по собств. ф-циям оператора

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

$$\underbrace{\langle x|\psi\rangle}_{\psi(x)} = \int \underbrace{\langle x|p\rangle}_{\psi_p(x)}\underbrace{\langle p|\psi\rangle}_{\psi(p)}\,dp \text{, тогда } f(p) = |\psi(p)|^2$$

$$\text{т.е. } \psi(x) = \int\psi_p(x)\,\psi(p)\,dp \text{, где } \psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{i\frac{p}{\hbar}x}$$

слеме-

$\langle x|\ \psi\rangle$
Bra c ket

??? Аналогия $\sum_p |p\rangle\langle p|$

$\lvert\psi\rangle$	$\vec{a}$	
$\langle x\lvert\psi\rangle$	$a_i = \vec{a}\,\vec{e}_i$	$a_1 a_2 a_3$
$\langle y\lvert\psi\rangle$	$a_i' = \vec{a}\,\vec{e}_i'$	a_1', a_2', a_3'

$$\sum_x \langle p|x\rangle\langle x|p\rangle = \int \psi_p^*(x)\cdot\psi_p(x)\,dx$$

a_i : a_x, a_y, a_z

$\sum_{(k)}\sum_i a_i a_i \qquad a_i a_j$

$$\boxed{\sum_p |p\rangle\langle p| = \hat 1}$$

$$a_i a_j = \begin{pmatrix} a_1a_1 & a_1a_2 & a_1a_3 \\ a_2a_1 & & \end{pmatrix}$$ – внешнее произведение векторов

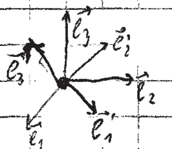
$$\langle x'|\left(\sum_p |p\rangle\langle p|\right)|x\rangle = \langle x'|x\rangle = \delta(x-x_0)$$

$$\boxed{\sum_p \psi_p^*(x')\cdot\psi_p(x) = \delta(x-x')}$$

условие полноты.

Чтобы вычислить матричный элемент оператора, следует обложить её скобками $\langle x'\hat P \ldots x\rangle$

Преобразование базисов.



$$e'_i = A_{ik}e_k$$

Глава 2. Ландау Лифшиц.

!!! Справочник: Корн, Корн.

Пусть ψ'_n – штрихованные вектора $\qquad \psi'_n(x) = \hat S\psi_n(x)$

$$\begin{pmatrix}x'\\y'\end{pmatrix} = A\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix} \rightarrow A = \begin{pmatrix}\cos\varphi, & \sin\varphi\\ -\sin\varphi, & \cos\varphi\end{pmatrix}$$

$\hat S^+$ – оператор, эрмитово сопряжённый с $\hat S$.

$$\psi'_n = \sum_m S_{nm}\psi_m$$

$$\int \psi'^*_m(x)\cdot\psi'_n(x)\,dx = \delta_{mn} \qquad (\varphi, \hat S\psi) = (\hat S^+\varphi, \psi)$$

$$\int \hat S^*\cdot\psi^*_m(x)\cdot\hat S\cdot\psi_n(x)\,dx = \int(\hat S^+\hat S\,\psi_m(x))^*\cdot\psi_n(x)\,dx$$, т.е. $\boxed{\hat S^+\hat S = \hat 1}$

т.к. $\hat S^{-1}\hat S = \hat 1$, то

$\boxed{\hat S^+ = \hat S^{-1}}$ т.е. $\hat S$ – унитарный оператор.

Если собственные ф-ции оператора образуют ОНБ – ~~образ~~ правые и левые операторы совпадают.

$$\sum_n |\psi_n(x)|^2 = \text{inv} = 1$$

! Унитарное преобразование сохраняет нормировку волновой ф-ции.

$$\Psi(t) = \hat U\,\psi(0)$$

оператор эволюции (тоже унитарный)

! Унитарное преобразование соответствует переходу к другому базису

Преобразование базисов к классич. механике $\xrightarrow{\text{соответствует}}$ Каноническому преобразованию в классич. механике.

gate - затвор.

Соотношение неопределенностей

Одномерная задача
$\downarrow$
$\Psi(x)$
$\Psi(k)$

$$\left.\begin{aligned}\hat{x} &= x\\ \hat{k} &= -i\frac{\partial}{\partial x}\end{aligned}\right\}$$ Вычислим коммутатор:

$$[\hat{k},\hat{x}] = \hat{k}\cdot\hat{x} - \hat{x}\cdot\hat{k} = -i\frac{\partial}{\partial x}x + xi\frac{\partial}{\partial x}$$

$$[\hat{k},\hat{x}]\,\Psi(x) = \underbrace{-i\frac{\partial}{\partial x}(x\Psi(x))}_{\parallel} + xi\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x) = -i\Psi(x)+\text{, т.е.}$$

$$-i\Psi(x) - ix\frac{d\Psi}{\partial x}$$

$[\hat{k},\hat{x}] = -i\hat{1}$, т.е.

$\hat{k}$ и $\hat{x}$ – не коммутируют.

Если $[\hat{k}_2, \hat{r}_1] = -i\delta_{e}$ – не коммутируют.

!!! Док-ть, что Ψ зависит от таких переменных, операторы которых коммутируют между собой.

$\Psi(p_x, y, z)$ – возможна, $\Psi(x, \cancel{p_x}, y, z)$

$\boxed{T1}$ Если два оператора имеют одинаковую систему ф-ций, то они коммутируют

Верна и $\boxed{T2}$, обратная к $\boxed{T1}$

q- числа {операторы}

c- числа {обычные числа}

$[\hat{p}\hat{x}] = \hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p} = i\hbar$ – коммутируют на c-число

$\hat{x} = x$

$\hat{p}_x = \cancel{\partial} -ih\,p_x$

Доказательство $\boxed{T1}$

Пусть $\hat{A}$, $\hat{B}$ – два оператора, причём

$\hat{A}|n\rangle = A_n|n\rangle$
$\hat{B}|n\rangle = B_n|n\rangle$

Докажем, что A и B – коммутируют.

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|\Psi\rangle =?\ \sum_n(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})$$

разложим ψ в ряд по n:

$$\left.\begin{aligned}|\Psi\rangle &= \sum_n |n\rangle\langle n|\Psi\rangle\\ \Psi &= \sum C_n\Psi_n(x)\end{aligned}\right\}$$

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|\Psi\rangle = \sum_n\langle n|\Psi\rangle(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|n\rangle =$$

$$= \sum_n\langle n|\Psi\rangle(A_nB_n - B_nA_n)|n\rangle = 0$$

Док-во $\boxed{T2}$

$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$. Пусть система ф-ций оператора A известна.

$\downarrow$

Запишем равенство в матричном виде. $\langle m|\underset{\uparrow}{\hat{A}}\hat{B} - \underset{\uparrow}{\hat{B}}\hat{A}|n\rangle = 0 \Rightarrow$, тогда получаем

вставили сюда единичные операторы

$$\sum_k\langle m|A|k\rangle\langle k|B|n\rangle - \cancel{\langle m|B|k\rangle\langle k|}$$
$$-\langle m|B|k\rangle\langle k|A|n\rangle = 0$$

Пусть k – собств. ф-ция A, тогда $A_k\langle m|k\rangle = A_k\cdot\delta_{mk}$ – оператор в своём собственном представлении диагонален

$$\sum_k\delta_{mk}A_k\langle k|B|n\rangle - \langle m|B|k\rangle A_k\delta_{kn} = 0$$

$$A_m\langle m|B|n\rangle - A_n\langle m|B|n\rangle = 0$$

$(A_m - A_n)\langle m|B|n\rangle = 0$, т.е. если $m \neq n$, то $\langle m|B|n\rangle = 0$, т.е.

B – диагональный оператор, т.е. разложим по своим собств. ф-ц.

$$\hat{A}|A\rangle = A|A\rangle$$

$\Psi(x) = ?$ $\quad |\Psi\rangle = \sum\limits_{A} |A\rangle\langle A|\Psi\rangle$, тогда

$$|\langle A|\Psi\rangle|^2$$

$\Psi(x,y,z) = \Psi(\vec{r})$, делаем преобразование Фурье по 3-м переменным и $\Psi(p_x, p_y, p_z) = \Psi(\vec{p})$

Почему не бывает $\Psi(x, p_x) = ?$, т.к. $\hat{x}$ и $\hat{p}_x$ - не коммутируют, т.е. у них отсутствует общая собств. система ф-ций.

В классич. механике x, p_x - канонически сопряжённые величины

$$[p_k x_l] = -i\hbar\,\delta_{kl} \qquad k = x, y, z \quad l = x, y, z$$

О.1 Переменные, операторы которых коммутируют называют собственным набором

Соотношение неопределённостей

Рассмотрим $\Psi(x) = \int \Psi(k)\, e^{ikx} \frac{dk}{2\pi}$ - Преобразование Фурье

$$\underset{\langle x|k\rangle}{\underset{\shortparallel}{\Psi_k(x)}} = \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}}$$

$$\langle x|\Psi\rangle = \int \langle x|k\rangle\langle k|\Psi\rangle\, dk$$

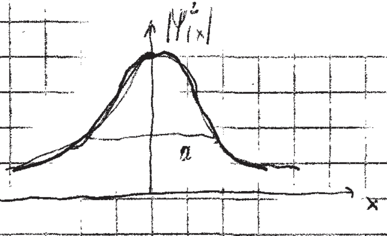
$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k}{2m}$$

$$i\hbar\dot{\Psi} = \frac{p^2}{2m}\Psi$$

$$\Psi(x,t) = \int \Psi(k)\, e^{-i\omega(k)t + ikx} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}}$$

$\Psi(k)$ - Фурье - преобразование начальных условий

Пример:



Пусть при $t = 0$: $\Psi_0(x) = A e^{-\frac{x^2}{4a^2}}$

Вычислим $\Psi(k) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{4a} - ikx}\, dx$

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} |\Psi_0(x)|^2 dx = 1 = A^2 \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{2a^2}}\, dx = A^2 a\sqrt{2\pi}$$

$$A^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,a}$$

$$A = \frac{1}{(2\pi a^2)^{\frac{1}{4}}}$$

т.е. $\Psi_0(x) = \frac{1}{(2\pi a^2)^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{x^2}{4a^2}}$

$$\Psi(k) = \int \Psi_0(x)\, e^{-ikx}\, dx = \frac{1}{(2\pi a^2)^{\frac{1}{4}}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{4a^2} - ikx}\, dx = \frac{\sqrt{2\pi}\,\sqrt{2a^2}}{(2\pi a^2)^{\frac{1}{4}}}\, e^{-\frac{2k^2a^2}{2}} =$$

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{2} + ikx}\, dx = \sqrt{2\pi}\, e^{-\frac{k^2}{2}}$$

$$\Psi(k) = \sqrt{2}\,(2\pi a^2)^{\frac{1}{4}}\, e^{-k^2a^2}$$

Если $|\Psi(x)|^2 \sim e^{-\frac{x^2}{2a^2}}$

$|\Psi(k)|^2 \sim e^{-2k^2a^2}$

$$\left.\begin{aligned} & a^2 = (\Delta x)^2 = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\Psi(x)|^2 dx \\ & \Delta x = a \\ & \Delta k = \frac{1}{2a} \end{aligned}\right\} \quad \Delta x \cdot \Delta k = \frac{1}{2}$$

В случае $\int \delta(x-x')e^{-ik(x-x')+ikx'}dx = e^{ikx'}$

$\Delta p = \hbar \Delta x$,

$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2}$ в общем случае $\boxed{\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}}$ ↗ квантовая частица не обладает траекторией.

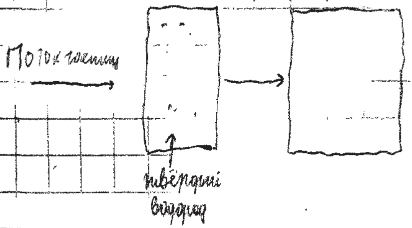
$\hat{X}\Psi_x(x) = A\cdot\Psi_x(x)$

$\Psi_x(x) = \delta(x-x')$

т.е. $\Psi(x) = \int \Psi(x')\delta(x-x')dx'$

Измерение в квантовой механике

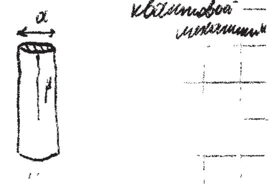
Мальденштам Леонтович по теории относит., оптике и квантовой механике



$\Delta k \cdot \Delta x = \frac{1}{2}$ – для Гаусса

$\boxed{\Delta k \cdot \Delta x \gtrsim \frac{1}{2} \sim 1}$

Соотношение неопределённостей Гейзенберга: 1927

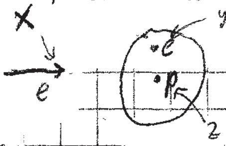


Разрешающая способность $\Delta x \sim \lambda \frac{f}{a}$

Измерение координаты.

Процесс измерения – взаимодействие исследуемой частицы с прибором.

1) Объект ⊕ прибор ⊕ взаимодействие
2) Классичность прибора



$\Psi_e(x)$, $\Psi_A(y,z)$ } Если бы они не зависели, то $\Psi = \Psi_e(x)\Psi_A(y,z)$

Независимые события 1, 2

$f(x_1, x_2) = f(x_1)f(x_2)$

$f(x_1) = \int f(x_1, x_2)dx_2$

O P ↘ $\Psi(y) = \sum C_n \Psi_n(y)$ $\Psi_e = e^{ikx}$

Ψ_n – собственные ф-ции оператора энергии (гамильтона)

Состояние с min энергией – основное состояние

Состояние с $E > E_{min}$ – возбуждённое

$\Psi_{нач} = e^{ikx}\Psi_0(y)$

После взаимодействия имеем суперпозицию всевозможных произведений

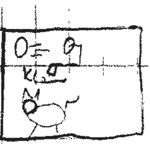
$$\Psi_F = \sum_k \sum_n C_n \Psi_n(y) e^{ikx} \neq \Phi(x)\cdot G(y)$$

Как бы электрон далеко не улетел у него нет волновой ф-ции

В процессе измерения в $\Psi = \sum_k \sum_n C_n \Psi_n(y) e^{ikx}$ можно выделить один член (редукция волнового пакета)

$C_n \Psi_n(y) e^{ikx} = \Phi(x) G(y)$ – уже можно представить

Шрёдингеровский кот



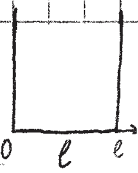
$\Psi_{нач} = |$кот жив, ядро возб.$\rangle$

$\Psi_K = A(t)|$кот жив, ядро возбужд.$\rangle + B(t)|$кот мёртв, ядро в основном состоянии$\rangle$

Парадокс Эйнштейна – Розена – Подольского

$M=0$ $\Psi_{нач} = |$связанное$\rangle$ $\Psi_{кон} = |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle\cdot|\uparrow\rangle$; → производим измерение 1 частицы: $P = \frac{1}{2}$ ↑, $P = \frac{1}{2}$, что ↓ т.е., что у волновой ф-ции другой частицы ↓.

Уравнения Шредингера



$$E_n \Psi_n = \hat{H}\Psi_n$$

$$\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\frac{\pi n}{l}x = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin k_n x \qquad k_n = \frac{\pi n}{l}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$$

~~$\Psi = \sum C_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$~~ $\Psi_{n(x)}$

$$\Psi = \sum C_n \Psi_n(x) \rightarrow |\Psi(x)|^2 = \sum_{n,m} C_n C_m^* \Psi_m(x)\Psi_n(x)$$

$$\overline{E} = \sum E_n |C_n|^2$$

Эволюция амплитуд во времени описывается уравнением Шредингера.

$i\hbar\dot{\Psi} = \hat{H}\Psi$ ← (Эволюционные уравнения) форма уравнения Шредингера

Кл. мех ← 1. оптика
Кв мех ← волновая оптика

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r})$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + U(\vec{r}) = 0$$

Может записать любое ур-ние:

$$\ddot{X} + X = 0$$

$$\begin{cases} \dot{x} = y \\ \dot{y} = -x \end{cases} \rightarrow i\hbar\dot{\Psi} = H\Psi$$

$$\Psi = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \rightarrow H\Psi = \begin{pmatrix} y \\ -x \end{pmatrix} i\hbar$$

$$H = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

Определим $\hat{H}$: $\Psi = A e^{i\frac{S}{\hbar}}$ – переход к классической механике.

т.е. при подстановке $\hat{H} \rightarrow H \rightarrow -\frac{\partial S}{\partial t}$

На компьютере

$$\dot{\Psi} = \frac{\Psi(t+\Delta t) - \Psi(t)}{\Delta t} \qquad \Delta t \ll \text{характерного масштаба } \Psi.$$

т.е. $\Psi(t+\Delta t) = \Psi(t) + \frac{1}{i\hbar}\Delta t\,\hat{H}\Psi$, т.е. $\frac{i}{\hbar}\hat{H}$ – оператор бесконечно малой трансляции во времени

т.е.

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

$$\Psi_{(x+\Delta x)} = \Psi_{(x)} + \Delta x\frac{\partial\Psi}{\partial x} + \ldots \simeq \left(1 + \Delta x\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi_{(x)}$$

Смысл з-на сохранение величины в квантовой механике.

Что значит какая-то „величина сохраняется" на квантовом языке?

Это значит, что если $\hat{A}\Psi$, то действуя $\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\hat{A}\Psi = \delta(A\Psi)$

$$\delta\Psi = \Psi(t+\Delta t) - \Psi(t)$$

но $\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\hat{A}\Psi = \frac{1}{i\hbar}\hat{A}\hat{H}\Psi = A(\delta\Psi)$

$\hat{H}, \hat{A}$ – эрмитовы.

т.е. **!** величина сохраняется, если её оператор коммутирует с $\hat{H}$ – гамильтонианом.

Решить ур-ние $i\hbar\dot{\Psi} = \hat{H}\Psi$ это значит найти

$$\Psi(t) = \hat{U}\Psi(t=0)$$

В гамильтониане не может быть недиагональных эл-тов

Шредингеровский подход выявляет не симметрию пространственных и временных координат.

$$\begin{cases} \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \\ \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} \end{cases}$$

t, x – несимметричны

$i\hbar\dot{\psi} = \hat{H}\psi$ Пусть $\hat{H} \neq \hat{H}(t)$ – не зависит явно от времени.

т.е. решение можно искать в виде преобразования Фурье по времени.

$$\Psi = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi = e^{-i\omega t}\psi$$ ← в квантовой механике $e^{-i\omega t}$ ← всегда.

Получаем $E\psi = \hat{H}\psi$ – стационарное ур-ние.

$E_n\psi_n = \hat{H}\psi_n$ – стационарные состояния

$t \sim 0 \quad \Psi = \psi_n$

$t \quad \Psi = e^{-\frac{iE_nt}{\hbar}}\psi_n$

$$\Psi(x, t=0) = \sum_n C_n \psi_n(x)$$

$$\Psi(x,t) = \sum C_n e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \cdot \psi_n(x)$$ – общее решение

где $C_n = \int \Psi(x,0)\,\psi_n^*(x)\,dx$

$$\Psi(t,x) = \sum_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}\int \psi_n^*(x)\,\Psi(x)\,dx.$$

$$\langle x|\Psi\rangle = \Sigma_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}\langle x|n\rangle\langle n|\Psi\rangle$$

или

$$|\Psi\rangle = \sum_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}|n\rangle\langle n|\Psi\rangle$$, т.е. $\boxed{\hat{U} = \sum_n |n\rangle e^{-i\frac{E_nt}{\hbar}}\langle n|}$ – оператор эволюции

или $\boxed{\hat{U} = e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}}$

Как определить ф-цию от оператора $\hat{A}$.

$f(\hat{A})$: $\quad A' = S^{-1}AS$, где A' – diag оператор.

Если написать:

$E_n\psi_n = H\psi_n$, т.е. $\underset{\delta_{nm}E_n}{\underset{\parallel}{H_{nm}}} = \langle n|H|m\rangle$ – матрица оператора $\hat{H}$ в собственном представлении.

$\boxed{f(\hat{A}) = \hat{S}f(\hat{S}^{-1}\hat{A}\hat{S})\cdot\hat{S}^{-1}}$ – определение ф-ции от оператора.

Поскольку степени операторов определены то можно написать другое определение. $\boxed{f(\hat{A}) = f(0) + \frac{\partial f}{\partial x}A + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}A^2 + \ldots}$

$$A^n = S(S^{-1}AS)^nS^{-1} = S\underbrace{(S^{-1}A\overset{\text{Единичный оператор}}{\overbrace{S, S^{-1}}}AS, \ldots)}_{n\text{ раз}}S^{-1} =$$

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

$U\psi_n = e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}\psi_n$

$$f\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & & 0 \\ 0 & 0 & \ldots & \lambda_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(\lambda_1), & 0, & 0 \\ 0, & f(\lambda_2), & 0 \\ 0, & 0 & f(\lambda_n) \end{pmatrix}$$

Представление Гейзенберга.

$\hat{U} = e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}$ – унитарный оператор, т.е $UU^+ = \hat{1}$

$\downarrow$

$U^+ = e^{\frac{iH^+t}{\hbar}}$ Эрмитово сопряжение: $(\varphi, AB\psi) = (A^+\varphi, B\psi) = (A^+B^+\varphi, \psi)$

$(AB)^+ = B^+A^+$ $\quad \bar{\hat{A}}(t) = \int \Psi^*(t,x)\,\hat{A}(t)\,\Psi(t,x)\,dX.$

$$\bar{\hat{A}} = \langle\Psi(t)|\hat{A}|\Psi(t)\rangle$$

$|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}|\Psi(0)\rangle = U|\Psi(0)\rangle$

$\langle\Psi(t)| = \langle\Psi(0)|e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$

Д/з Эрмитово сопряж. $\left(\overset{x}{h}\,\overset{\vee}{y}\right)$

<u>Гейзенберг:</u> вектора состояний от времени не зависят, зависят только операторы.

$$\bar{A} = \langle\Psi(0)|\underbrace{e^{i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}\hat{A}e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}}\Psi\Psi(0)\rangle$$

$\hat{A}_Г$ – гейзенберговский оператор

$$\dot{\hat{A}}_Г = \frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}\hat{A}_Г - \hat{A}_Г\hat{H}\right) = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}_Ш\hat{A}_Г]$$

$H = \frac{p^2}{2m} + U(r)$ – Шредингеровский оператор.

$\hat{H}_Г = e^{i\frac{Ht}{\hbar}}\hat{H}e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} = \hat{H}_Ш$

! Уравнения для операторов в форме Гейзенберга совпадают с ур-ниями в форме Ньютона.

$$\begin{cases}\dot{r} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, r] = \frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2m}r - r\frac{p^2}{2m}\right) \overset{?}{=} \frac{p}{m}\\ \dot{p} = -\nabla U = \frac{i}{\hbar}(U\hat{p} - \hat{p}U)\end{cases}$$

✓ Ландау Лифшиц

$\dot{\hat{A}}_Г = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{A}_Г]$

$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r})$ $\rightarrow$ $\begin{cases}\dot{r} = \frac{p}{m}\\ \dot{p} = -\nabla U\end{cases}$

$$A_Г = \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}Ht}}_{\overset{\parallel}{U^+}} A_Ш \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}}_{\overset{\parallel}{U}}$$

$$U^+(p_i \overset{UU^+}{\downarrow} r_k - r_k p_i)U$$

$$\underbrace{U^+p_iU}_{\overset{\parallel}{p_Г}}\underbrace{U^+r_kU}_{\overset{\parallel}{r_Г}} = -i\hbar U^+\delta_{ik}U = -i\hbar\delta_{ik}$$

$$[p_Г, r_Г] = -i\hbar\delta_{ik}$$

! Таким образом, если оператор коммутирует на число, то коммутационные соотношения Шредингера и Гейзенберга совпадают.

! Для оператор справедливы обычные ур-ния Гамильтона.

[Коммутац. ~~теор~~ соотношения задают <u>алгебру</u> операторов в квантовой механике]

→ матем. модели с другими заданными операторами

$\Psi(\vec{r}, t)$ t – параметр волновой ф-ции в несимметричной квантовой механике.

$i\hbar\dot{\Psi} = \hat{H}\Psi$

Есть Шредингеровский оператор величины $\hat{f}$. Найти $\dot{\hat{f}}$

Необходимо, чтобы $\frac{\partial}{\partial t}\langle\Psi|f|\Psi\rangle = \langle\Psi|\dot{\hat{f}}|\Psi\rangle$ – логически правильно

$$\langle\dot{\Psi}|f|\Psi\rangle + \langle\Psi|\frac{\partial f}{\partial t}|\Psi\rangle + \langle\Psi|f|\dot{\Psi}\rangle$$

~~несю~~

т.к. $|\dot{\Psi}\rangle = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}|\Psi\rangle$ $\qquad$ $\langle\dot{\Psi}| = -\frac{1}{i\hbar}\langle\Psi|H$

Таким образом, $\dot{\hat{f}} = \frac{\partial f}{\partial t}$

поскольку $\langle\Psi|$ и $|\Psi\rangle$ - комплексно сопряжены, то

$$\langle\dot{\Psi}|f|\Psi\rangle + \langle\Psi|f|\dot{\Psi}\rangle = \langle\Psi|\frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{f}]|\Psi\rangle$$

значит $\boxed{\dot{\hat{f}} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[H,f]}$ - определение

Матрица плотности. The Matrix of Density

Рассмотрим систему, которая представляет собой 2 независимые части:

$A_x \overset{I}{(x)}$ $\overset{II}{(y)} A_y$

не взаимодействуют в данный момент времени.

$$i\hbar\dot{\Psi} = (\hat{H}_1+\hat{H}_2)\Psi \to \psi = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\Psi \to E\Psi = (\hat{H}_1+\hat{H}_2)\Psi$$

общее решение

$\to \Psi = X(x)\,Y(y)$

$\hat{H}_1\Psi(x) = \mathcal{E}^{(1)}\Psi(x) \quad \to \quad \mathcal{E}_n^{(1)}\;\Psi_n^{(1)}(x)$

$\hat{H}_2\Psi(y) = \mathcal{E}^{(2)}\Psi(y) \qquad\quad \mathcal{E}_n^{(2)}\;\Psi_n^{(2)}(y)$

$E\,\cancel{X}(x)\,\cancel{Y}(y) = Y(x)\hat{H}_1 X(x) + X(x)\hat{H}_2\cancel{Y}(y)$

тогда (1) $\boxed{\Psi = \sum_{n,m} C_{n,m}\, e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathcal{E}_n^{(1)}+\mathcal{E}_m^{(2)})t}\,\Psi_n^{(1)}(x)\,\Psi_m^{(2)}(y)}$

общее решение

запутанное состояние entangled state

$\mathcal{E}_1 X(x) = H_1 X(x)$

$\mathcal{E}_2 Y(y) = H_2 Y(y)$

Вопрос обладает ли X волновой ф-цией.

(2) $\Psi(x,y) = \Psi(x)\,\Psi(y)$ - тогда говорят что $\Psi(x)$ обладает волновой ф-цией

$$\bar{A}_x = \int \Psi^*(x,y)\,\hat{A}_x\,\Psi(x,y)\,dx\,dy \overset{(2)}{=} \int \Psi^*(y)\,\Psi^*(x)\,\hat{A}_x\,\Psi(x)\,\Psi(y)\,dx\,dy = \int \Psi^*(x)\,A_x\,\Psi(x)\,dx$$

! Если состояние запутанное, то волновой ф-ции сис-мы X не существует, т.е. система X находится в смешанном состоянии.

Если система в незапутан. ~~запут.~~

$$\bar{A}_x = \int \Psi^*(x,y)\,A_x\,\Psi(x,y)\,dx\,dy$$

определить $\boxed{\rho(x,x') = \int \Psi^*(x',y)\,\Psi(x,y)\,dy}$

Матрица плотности

т.к. $\Psi(x,y) = \sum_{n,m} C_{nm}(t)\,\Psi_n^{(1)}(x)\cdot\Psi_m^{(2)}(y)$

в силу ОНБ

$$\bar{A}_x = \sum_{n',m'}\sum_{n,m} C^*_{n'm'}(t)\,C_{mn}(t)\int \Psi^*_{m'}(y)\,\Psi_m(y)\,dy \int \Psi^*_{n'}(x)\,\overset{\circ}{A}_x\,\Psi_n(x)\,dx = \sum_{n'n,m} C^*_{n'm}(t)\cdot C_{nm}(t)\langle n'|A|n\rangle$$

$$\bar{A}_x = \sum_{n'}\sum_{n,m} C^*_{n'm}(t)\cdot C_{nm}(t)\int \Psi^*_{n'}(x)\,\overset{\circ}{A}_x\,\Psi_n(x)\,dx$$

$\bar{A} = \int \Psi^*(x',y)\,A_x\,\Psi(x,y)\Big|_{x=x'}dx\,dy$, т.е. $\boxed{\bar{A} = \int \left(\hat{A}\rho(x,x')\right)\Big|_{x=x'}dx}$ - вычисление средних в запутанном состоянии

$$\bar{A} = \sum_{nn'}\sum_{m}\int \Psi^*_m(y)\,\Psi_m(y)\,dy \int \Psi^*_{n'}(x)\,\hat{A}_x\,\Psi_n(x)\,dx$$

$\bar{A} = \sum_{n,n'}\sum_{m} \underbrace{C^*_{n'm}(t)C_{nm}(t)}_{\rho_{m,n}}\langle n'|A|n\rangle \to \boxed{\bar{A} = \sum_{nn'}\rho_{nn'}\langle n'|A|n\rangle = \sum_{n,n'}\rho_{nn'}A_{n'n}} =$

Для оператора координаты: $n' \to x'$ $\quad n \to x$

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

$$\bar{A} = \sum_{n'}\rho_{mn'}A_{n'k} = (\hat{\rho}\hat{A})_{mk} = \sum_{n}(\rho A)_{nn} = Sp(\rho A) = \overset{\text{trace}}{tr}(\rho A)$$

$\boxed{\hat{\rho}_{(n'n)} = \sum_m C^*_{n'm}(t)\, C_{nm}(t)}$ – статистический оператор → заменяет волновую ф-цию в смеси состояний

где $C_{nn}(t) = C^0_{nm}\, e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_n^{(1)} + \varepsilon_n^{(2)})t}$

$\rho_{n'n}$ – матричные элементы абстрактного оператора

$A_{nm} = \langle n | A | m \rangle$

$\hat{A} = \sum_{n,m} |n\rangle \langle n | A | m \rangle \langle m|$ $\qquad \sum_n \psi_n^*(x') \cdot \psi_n(x) = \delta(x - x')$

$\boxed{\sum_n |n\rangle \langle n| = \hat{1}}$

$\hat{\rho} = \sum_{n,m} |n\rangle \langle n | \rho | m \rangle \langle m|$ Как матрица плотности будет развиваться во времени и $\rho(t=0)$ – известна.

$C_{nm} = C^0_{nm}\, e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_n^{(1)} + \varepsilon_n^{(2)})}$

$|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} |\Psi(0)\rangle$ – догадаемся как $\rho = ?$

$\rho(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \underbrace{|n(t=0)\rangle \langle n(t=0)| \rho | m(t=0)\rangle \langle m(t=0)|}_{\hat{\rho}(t=0)} e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}$

$\rho(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\, \rho(t=0)\, e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$, $\qquad A_Г = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} A_m\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$

отличие в знаке обусловлено

$\langle \Psi(t) | A_m | \Psi(t) \rangle$ $\qquad |\Psi\rangle \rho_{\psi\psi} \langle \Psi|$

$\uparrow$ из вычисление среднего

$\boxed{\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho]}$ – уравнение Неймана → вместо Ψ для смеси состояний

„Статистическая механика", Фейнман

Уравнение Шредингера для скалярной частицы

Скалярная частица → в. ф-ция – скалярная

$$i\hbar\dot{\Psi}=\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}+U(\vec{r})\right]\Psi$$

Постановка общего решения

$$i\hbar\dot{\Psi}=\left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m}+U(x)\right]\Psi$$

н.у. $\{t=0\}$ $\Psi_0(x)$ $\qquad |\Psi(t)\rangle=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\Psi(0)\rangle$ $\qquad \Psi(x,t)=\int G(x,x',t)\Psi_0(x')dx$

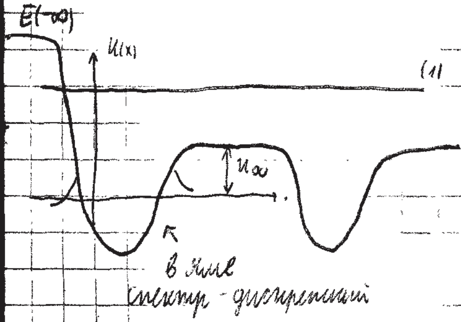
$\langle x'|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|x\rangle=G(x',x,t)$ – ф-ция Грина

ф-ция Грина – оператор эволюции в x представлении

$$\langle x'|\Psi(t)\rangle=\sum_x\langle x|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|x\rangle\langle x|\Psi(t=0)\rangle=\sum_x\langle x'|e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|x\rangle\langle x|\Psi(t=0)\rangle$$

Для нахождения ф-ции Грина $\quad E_n|n\rangle=\hat{H}|n\rangle$

$\boxed{H\Psi_n(x)=E_n\Psi_n(x)}$ – базисная задача для решения нестационарной задачи.



$$E\Psi=\left[-\frac{\partial^2}{2m\,\partial x^2}+U(x)\right]\Psi$$

$\boxed{(1)}$ волновая ф-ция не локализована

$$(E-U_\infty)\Psi+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}=0$$

$x\to\infty$ $\qquad k^2=\frac{2m}{\hbar^2}(E-U_\infty)>0$

$\Psi''_{(x)}+k^2\Psi=0\to\quad \Psi(x)=e^{\pm ikx}$

$\int|\Psi(x)|^2dx=\infty$ – интеграл расходится, значит ф-ции не могут быть нормированы, спектр сплошной

$x\to-\infty$

$\Psi''_{xx}-\varkappa^2\Psi=0\qquad \varkappa^2=\frac{2m}{\hbar}[U(-\infty)-E]>0$

$\Psi=e^{-\varkappa x}$

! Ф-ции дискретного спектра не вырождены, т.е. 1 $\overset{\text{соб. зн}}{\text{значение}}$ ↔ 1 собств. ф-ция.

Док-во $\quad$ Пусть $E_n\Psi_n=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+U(x)\right]\Psi_n\ \Big|\cdot\chi$

$$E_n\chi=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+U(x)\right]\chi\ \Big|\cdot\Psi_n\qquad W=\begin{vmatrix}\chi&\Psi\\ \chi'&\Psi'\end{vmatrix}$$

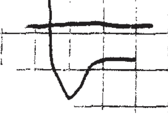
$$\chi\Psi''-\Psi\chi''=0=\frac{\partial}{\partial x}(\chi\Psi'-\Psi\chi')=\frac{\partial}{\partial x}W=0,\text{ т.е.}$$

$W=const$

все ф-ции на бесконечности $=0$, т.е. $W=0$

$\alpha\chi+\beta\Psi=0$ – линейно зависимы

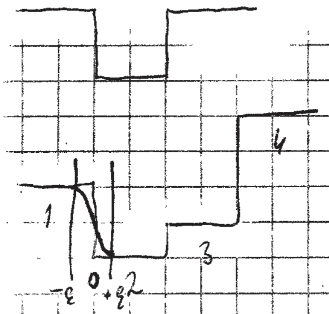
т.е. $\chi=C\Psi$ – одна и так же собств. ф-ция.



↙ теорема также справедлива

Прямоугольная яма

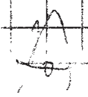
$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U_n)\right]\Psi = 0$$



$U = U_n \{x \in x_{n-1}, x_n\}$

$c_n e^{ik_nx} + d_n e^{-ik_nx}$

$$\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\right]\Psi\, dx = 0$$



$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi'_x\Big|_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} + \int U(x)\Psi(x)dx = E\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\Psi dx$$

$Z=$

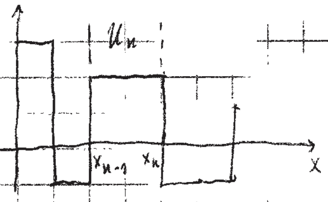
$$\varepsilon\to 0 \quad \Psi_x\Big|_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \to 0 \to \Psi'_x\Big|_{0-\varepsilon} = \Psi'_x\Big|_{0+\varepsilon}$$

$$\Psi\Big|_{0-\varepsilon} = \Psi\Big|_{0+\varepsilon}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''_{xx} + U(x)\Psi = E\Psi \to \Psi = a_n e^{ik_nx} + b_n e^{-ik_nx}$$

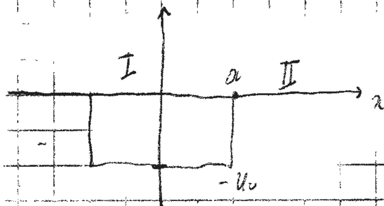
$x \in [x_{n-1}, x_n]$

$$k_n = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar}(E-U_n)}$$



$$\left.\begin{matrix}[\Psi]=0\\ [\Psi'_x]=0\end{matrix}\right\} \Psi \text{ и } \Psi'_x \text{ - непрерывны.}$$

Задача о потенциальной яме.



$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''_{xx} + U(x)\Psi = E\Psi$$

При

$$P: \left.\begin{matrix}x \to -x\\ H(x) = H(-x)\end{matrix}\right\} \text{преобразование инверсии}$$

$P\Psi = \varphi$, еще раз $P\varphi = \Psi$

т.е.

$P^2\Psi = \Psi$

Собственные ф-ции оператора

p^2 : 1, a

p : $\lambda = \pm 1$

коммутатор ↓

Получим т.к. $[\hat H, P] = 0$ - з-н сохранения чётности

! Все, что относится к св-вам волновой ф-ции не имеет классическ аналога

$$\begin{cases}\Psi''_{xx} + \frac{2m}{\hbar^2}(E+|U_0|)\Psi = 0\\ \Psi''_{xx} + \frac{2m}{\hbar^2}E\Psi = 0\end{cases} \to$$

если $E>0$, то в области II - сплошной спектр

если $E<0$, то в области II - дискретный спектр

$$\begin{cases}\Psi(a-\varepsilon) = \Psi(a+\varepsilon)\\ \Psi'_x(a-\varepsilon) = \Psi'(a+\varepsilon)\end{cases}$$

Рассмотрим $E<0$, т.е. $E=-|E|$, обозначим $k^2=\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - |E|)$ ← без корня

$\varkappa^2=\frac{2m}{\hbar^2}|E|$

тогда $\begin{cases}\psi''_{xx}+k^2\psi=0 \longrightarrow \psi = \begin{cases}\cos kx & - \text{ чётная} \\ \sin kx & - \text{ нечётная}\end{cases} \\ \psi''_{xx}-\varkappa^2\psi=0 \longrightarrow \psi=e^{\pm\varkappa x} \to \psi=e^{-\varkappa x} - x>0\end{cases}$

Чётная серия

$\cos ka = Ce^{-\varkappa a}$

$-k\sin ka = -\varkappa Ce^{-\varkappa a}$

Нечётная серия

$\sin ka = de^{-\varkappa a}$

$k\cos ka = -de^{-\varkappa a}$

$z=\frac{\psi'_x}{\psi}=\frac{\partial}{\partial x}(\ln\psi)$ – импеданс $\to \psi=e^{\int z\,dz}$

$\psi'_x = z\psi \to \psi''_{xx}=z_x\psi+z^2\psi$, т.е.

ур-ние Шредингера $\psi(z'_x+z^2+k^2(x))=0$, где $k^2(x)=\frac{2m}{\hbar^2}\{E-U(x)\}$

Получим $k\,\mathrm{tg}\,ka=\varkappa$ – чётная серия

$\mathrm{ctg}\,ka=-\varkappa$ – нечётная серия.

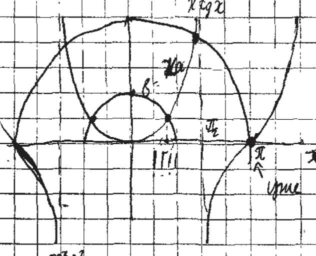
Введём $k^2+\varkappa^2=\chi^2$

$\varkappa^2=\chi^2-k^2$

~~$k\,\mathrm{tg}\,ka = k^2$~~

т.е. $\begin{cases} ka\,\mathrm{tg}\,ka=\sqrt{\chi^2-k^2}\,a & - \text{ чётная серия} \\ k\,\mathrm{ctg}\,ka=-\sqrt{\chi^2-k^2} & \end{cases}$

Для чётной серии

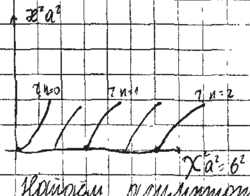


уже 2 решения

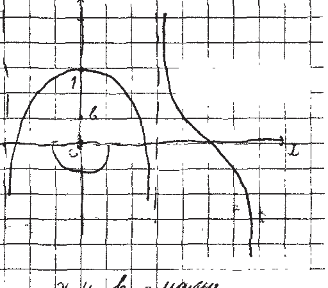
! В одномерной задаче в яме сколь угодно малой ширины есть уровень – связное состояние

$a^2\varkappa^2$ – безразмерная энергия

$\frac{2m}{\hbar^2}|E|\cdot a^2$



Для нечётной серии



Найдём асимптотику при малых b:

$ka\,\mathrm{tg}\,ka \sim (ka)^2$, т.е. $x^2=\sqrt{b^2-x^2}$

x и b – малые

$\varepsilon=\frac{2m_0}{\hbar^2}|E|a^2=a^2\varkappa^2$ – безразмерная энергия.

$\varepsilon=b^2-x^2$

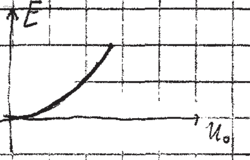
$b^2-b^2+x^2=\sqrt{b^2-x^2}$

$b^2-\cancel{\varepsilon}=\sqrt{\varepsilon} \to (\sqrt{\varepsilon})^2+\sqrt{\varepsilon}-b=0$

$\varepsilon\simeq b^4$

$\sqrt{\varepsilon}=-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\sqrt{1+4b^2}$

$$\frac{2m}{\hbar^2}|E|a^2 \approx \left(\frac{2m}{\hbar^2}|u_0|a^2\right)^2$$



$$|E| \simeq |u_0| \cdot \frac{2m}{\hbar^2}|u_0| \cdot a^2$$

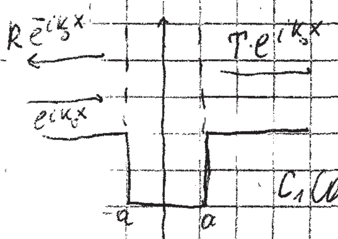
← в 1-ой и 2-й задачах в ямах есть уровень

$E > 0$

$$\psi''_{xx} + \frac{2m}{\hbar^2}(E + |u_0|)\psi = 0$$

$$\psi_{xx} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0$$

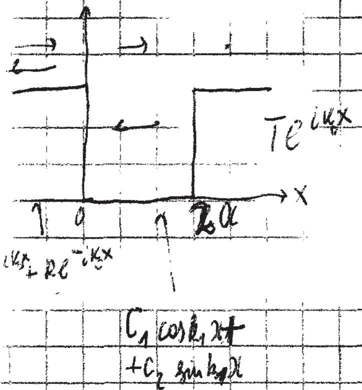
$$\begin{cases} \psi''_{xx} + k^2\psi = 0 \\ \psi''_{xx} + k_0^2\psi = 0 \end{cases}$$



$C_1\cos kx + C_2\sin kx$

$$x=-a \begin{cases} e^{-ik_0a} + Re^{ika} = c_1\cos ka - c_2\sin ka \\ ik_0(e^{-ik_0a} - Re^{ika}) = k(c_1\sin ka + c_2\cos ka) \end{cases}$$

$$x=a \begin{cases} c_1\cos ka + c_2\sin ka = Te^{ik_0a} \\ -c_1k\sin ka + c_2k\cos ka = ik_0Te^{ik_0a} \end{cases}$$



$$1 + R = C_1$$

$$i\frac{k_0}{k_1}(1 - R) = C_2$$

$$c_1\cos 2k_1a + C_2\sin 2k_1a = Te^{2ik_0a}$$

$$-C_1k_1\sin 2k_1a + C_2\cos 2k_1a = ik_0Te^{2ik_0a}$$

Импедансный метод: $Z = \frac{\psi_x}{\psi}$

$$Z = \frac{ik_0}{k_1}$$

$$Z\frac{1-R}{1+R} = \vartheta = \frac{C_2}{C_1}$$

$$\frac{-tg\, 2k_1a + \vartheta}{1 + \vartheta\, tg\, 2k_1a} = Z$$ – ф-ла пересчёта импеданса

$$R = \frac{Z - \vartheta}{Z + \vartheta}$$

$$R = \frac{(1 + Z^2)\, tg\, 2k_1a}{2Z + (1 - Z^2)\, tg\, 2k_1a}$$

$$|A|^2 = \frac{|\psi(z)|^2}{|\psi(z)|^2}$$

$$Te^{2ik_0a} = (1 + R)(\cos 2k_1a + \vartheta\sin 2k_1a)$$

$Z = i\frac{k_0}{k_1}$ – мнимая величина

$$|R|^2 = \frac{(k_1^2 - k_0^2)^2\, tg^2\, 2k_1a}{4k_0^2k_1^2 + (k_1^2 + k_0^2)^2\, tg^2\, 2k_1a}$$ (см. Ландафшиц)

$$k_0^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E \qquad k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - u_0)$$

На прошлой лекции были соотношения. $\varkappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2}|E|$

$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(|U_0| - |E|)$

$k\,\mathrm{tg}\,ka = \sqrt{\varkappa^2 - k^2} = \varkappa$

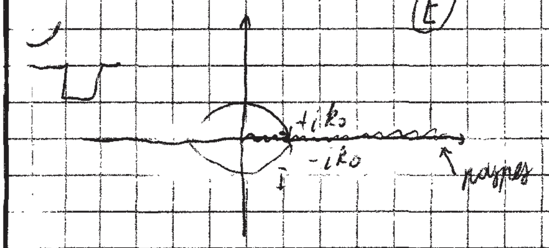
$k\,\mathrm{ctg}\,ka = -\sqrt{\varkappa^2 - k^2} = -\varkappa$

$|R|^2 + |T|^2 = 1$ – з-н сохранения потока вероятности.

Будем рассматривать R и T как R(E) и T(E) – аналитические ф-ии

e^{ik_0x}

R и T – амплитуды рассеяния.



При переходе I

$e^{-ik_0x} \to e^{-\varkappa_0 x}$

$ik_0 \to \varkappa_0$

$ik_0 = i\sqrt{E} = \sqrt{-E}$

Аналитические св-ва амплитуды рассеяния как ф-ии энергии

$e^{ik_0x} + Re^{-ik_0x}$ | | Te^{ik_0x}

$e^{\varkappa_0 x}$ | | $e^{-\varkappa_0 x}$

$|T| = \frac{4k_0^2k_1^2}{4k_0^2k_1^2 + (k_1^2 - k_0^2)^2\sin^2 k_1 a}$

$k_0^2 \to -\varkappa^2$

$k_1^2 \to +k^2$

рассеяние уровни

$ik_0 \to \varkappa_0 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\sqrt{-E_0}$

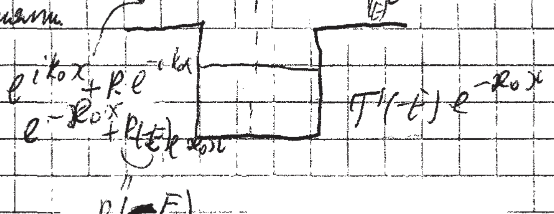
$\varkappa$

Γ_4 – полюса

$\sqrt{z} = \sqrt{\rho\, e^{i(\varphi + 2\pi n)}} = \sqrt{\rho}\, e^{i\frac{\varphi}{2} + i\pi n}$

Теорема коэффициент отражения имеет полюс при энергиях, соответствующих связанным состояниям.

Полюса совпадают с дискретными уровнями.



R(−E) имеет полюса в дискр. точках, которые соответствуют собств. энергиям уровням частицы в яме.

Fwes ani

Гармонический осциллятор

$m\ddot{x} + \omega_0^2 m x = 0$

$p = m\dot{x}$

$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$

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

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

$\hat{x}f = \int x' f(x')\delta(x-x')dx'$ – оператор умножения

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

$\hat{A} = \sum_{m,n} |m\rangle\langle m|A|n\rangle\langle n|$

$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ $\quad p_\xi = -i\frac{\partial}{\partial\xi}$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} = \frac{\hbar\omega}{2}\left(-\frac{\hbar}{m\omega}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega}{\hbar}x^2\right) = \frac{\hbar\omega}{2}\left(p_\xi^2 + \xi^2\right)$$

$\hat{H}\Psi = E\Psi \to E_n\Psi_n$, $\quad \Psi(x,t) = \sum C_n\Psi_n e^{-\frac{E_n}{\hbar}t}$

Если $E = \hbar\omega\varepsilon$, то

$\left[\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + \frac{1}{2}\xi^2\right]\Psi = \varepsilon\Psi$ ← ур-ние Эрмита $\quad \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$

$\Psi_n = e^{-\frac{\xi^2}{2}}\underbrace{H_n(\xi)}_{\text{полиномы}}$ Чебышева – Эрмита $\quad \varepsilon = \frac{1}{2} + n$

Лекция 1

$i\hbar\dot{\Psi} = H\Psi$ – ур-ние Шред.

$\hat{A}$ – оператор физ. величины

$A = \langle\Psi|A|\Psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*\hat{A}\Psi dx$ $\quad E\Psi = \hat{H}\Psi$ – стац. ур-ние Шр.

$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x)$ – гамильтониан

Задачи: 1) $U(x)$ – кусочно-линейная ф-ция piece wise

$\Psi(t,x) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\,\Psi(x)$

2) Свободное движение $H = \frac{\hat{p}^2}{2m}$

3) Гармон. осциллятор $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$

Гармонический осциллятор

$m(\ddot{x} + \omega^2 x) = 0$

Классически:

$x = C_1 e^{i\omega t} + C_2 e^{-i\omega t}$

X_{mn}

Кв. мех. $H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$

$E\Psi = \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right)\Psi$

$[p, x] = -i\hbar$

A - представление:

$A\Psi_n \sim A_n\Psi_n$

$B_{mn} = \langle \Psi_m | B | \Psi_n \rangle$, т.е.

A - диагонален.

~~$x_{mn} = x_{nn}\delta$~~

в x-представлении $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ $\hat{x} = x$

$$E\Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2\hbar}\right)\Psi = \omega\hbar\left(-\frac{\hbar}{2m\omega}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right), \quad \xi^2 = \frac{m\omega x^2}{\hbar}$$

$\varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega}$

$\varepsilon\Psi = \frac{1}{2}\left[-\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + \xi^2\right]\Psi$ - ур-ние Эрмита.

$\Psi_n = e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi)$

$-\Psi''_{\xi\xi} + \xi^2\Psi = 2\varepsilon\Psi$. При больших ξ можно пренебречь $\Psi''_{\xi\xi}$ и $\Psi \sim e^{-\frac{\xi^2}{2}}$

$\xi \to \infty$ $\Psi \sim e^{-\frac{\xi^2}{2}}$, $\Psi_\xi = -\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}}$

$C_1 e^{\frac{\xi^2}{2}} + C_2 e^{-\frac{\xi^2}{2}}$

$\Psi_{\xi\xi} = -e^{-\frac{\xi^2}{2}} + \xi^2 e^{-\frac{\xi^2}{2}}$

Будем искать решение в виде $\Psi = e^{-\frac{\xi^2}{2}}\cdot\chi(\xi)$

Подставим в ур-ние Эрмита: $\Psi''_{\xi\xi}$

$\Psi_\xi = -\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}}\chi + \chi'_\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}}$

$\Psi_{\xi\xi} = -e^{-\frac{\xi^2}{2}}\chi + \xi^2 e^{-\frac{\xi^2}{2}}\chi - 2\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}}\chi'_\xi +$

$+ \chi''_{\xi\xi} e^{-\frac{\xi^2}{2}}$

$$\boxed{\chi''_{\xi\xi} - 2\xi\chi_\xi = (1 - 2\varepsilon)\chi}$$

Ур-ние Эрмита.

Метод Лапласа:

применим к ур-нию ∀ порядка, но переменный коэфф линейный:

$\chi = \int_C e^{p\xi}\chi(p)\,dp$!!! Интеграл по контуру

см Ландау Лившиц „Кв мех-ка"

Распределение x. $|\Psi(x)|^2$ - плотность вероятности

Для $\hat{A}$. Необходимо разложить $\Psi(x)$ по собств. ф-ции A

$\langle x|\Psi\rangle = \sum_A \langle x|A\rangle\langle A|\Psi\rangle$

собств. ф-ции оператора A. $\Psi(A)$

$\frac{\partial}{\partial t}e^{i\omega t} \to i\omega e^{i\omega t}$

$-it\,u(t) \leftarrow \frac{\partial}{\partial\omega}u(\omega)$

А мы будем искать решение в виде ряда

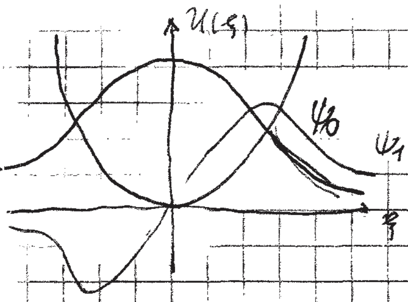
$\chi = \sum_{n=0}^{\infty} a_n\xi^n$ $\chi'_\xi = \sum_{n=0}^{\infty} n a_n \xi^{n-1}$

$\chi''_{\xi\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} n(n-1)a_n\xi^{n-2} = \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+2}(k+2)(k+1)\xi^k$.

подставим в решение

$a_{k+2}(k+2)(k+1) = (1 - 2\varepsilon + 2k)a_k$

$a_{k+2} = \frac{1 - 2\varepsilon + 2k}{(k+2)(k+1)}a_k$



Для [illegible] регулярности необходимо чтобы ряд был конечен (обрывался)

т.к. $a_{k+2} = \frac{1-2\varepsilon+2k}{(k+2)(k+1)} a_k$.

$$1-2\varepsilon+2k=0$$

$$\varepsilon = k+\frac{1}{2}$$

Есть чётные и нечётные серии, при них условиях.

$a_0=1$
$a_1=0$
$a_2=$
$a_4=$
} чётная серия

$a_0=0$
$a_1=1$
} нечётная серия

$a_4 = \frac{(1-2\varepsilon)(1-2\varepsilon+4)}{4!} a_0$

$a_2 = \frac{1-2\varepsilon}{1\,2} a_0$

$a_4 = \frac{1-2\varepsilon+4}{4\,3} a_2 = 0$ при $\varepsilon = 2+\frac{1}{2}$

$\psi_0 = e^{-\frac{\xi^2}{2}}$ $\varepsilon = \frac{1}{2}$

$\psi_1 = \xi e^{-\frac{\xi^2}{2}}$ $\varepsilon = \frac{3}{2}$

$\psi_2 = (1-2\xi^2) e^{-\frac{\xi^2}{2}}$

Н.у.: $a_0=0$, $a_1=1$ } для диф. ур-ния 2-го порядка ψ чётное.

$a_0=1$, $a_1=0$ } для д. ур-ния 2-го порядка ψ нечёт.

n-я волновая ф-ция имеет $n-1$ нуль, а нулевая ф-ция не имеет нулей

Матр. эл-ты координаты

$$x_{mn} = \langle m|x|n\rangle = \int \psi_m^*(x)\, x\, \psi_n(x)\, dx$$

Аппарат операторов рождения и уничтожения

$H = \frac{1}{2}(p^2+\xi^2)$ $(p^2+\xi^2) \neq (\xi+ip)(\xi-ip)$

$a = \frac{x+ip}{\sqrt{2}}$ $a^+ = \frac{x-ip}{\sqrt{2}}$ a - не эрмитов. $(AB)^+ = B^+A^+$

$a^+ = \frac{(x+ip)^+}{\sqrt{2}}$ $x^+ = x$, $p^+ = p$

$[p,x] = i\hbar$
$[p,p] = [x,x] = 0$

$$aa^+ - a^+a = 1$$

$$\frac{(x+ip)(x-ip) - (x-ip)(x+ip)}{2} = \frac{i[p,x] - i[x,p] + i[p,x] - i[x,p]}{2}$$

$= i[p,x] = 1$ - правильно

$H = \frac{1}{2}(aa^+ + a^+a)$

$\hat{H} = \hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}$

~~$\varepsilon = k+\frac{1}{2}$~~ a^+a - диагональн.

$$\langle \psi_n | a^+a | \psi_n \rangle = n$$

$a\psi_0 = 0$

$\psi_n \sim a^+\psi_{n-1}$

$\psi_{n-1} \sim a\psi_n$

~~a^+~~

a - оператор уничтож.

a^+ - оператор рождения.

Лекция № 2 { Фейнман „Статист. мех." Гл 6. §1 }

$a = \frac{x+ip}{\sqrt{2}}$ $a^+ = \frac{x-ip}{\sqrt{2}}$ $x = \frac{a+a^+}{\sqrt{2}}$

$ip = \frac{a-a^+}{\sqrt{2}}$

$H = a^+a + \frac{1}{2}$

$(\langle\alpha|a^+)^* = a|\alpha\rangle$

$\boxed{aa^+ - a^+a = 1}$

Утверждения: ① $a^+a|\overset{\text{собств. число}}{\alpha}\rangle = \alpha|\alpha\rangle$ – задача на собств. значения

Доказем полож. опред. нашего оператора: $\alpha\underbrace{\langle\alpha|\alpha\rangle}_{\overset{\text{нормиров. ф-ция}}{\longrightarrow} 1} = \langle\alpha|a^+a|\alpha\rangle = \||a|\alpha\rangle\|^2 \geqslant 0$

т.е.

$\langle\alpha|a^+$ и $a|\alpha\rangle$ – эрмитово сопряжённые

$\alpha \geqslant 0$

② вычислим $[a^+a, a] = a^+aa - aa^+a = -a$

$[a^+a, a^+] = a^+aa^+ - a^+a^+a = a^+$

т.е.

$a^+aa = a(a^+a - 1)$

$a^+aa^+ = a^+(a^+a + 1)$

Подействуем на собств. вектор α:

$a^+a\,a|\alpha\rangle = (\alpha-1)a|\alpha\rangle$

$a^+a\,a^+|\alpha\rangle = (\alpha+1)a^+|\alpha\rangle$

т.е. $a|\alpha\rangle$, $a^+|\alpha\rangle$ – собств. ф-ции a^+a

соотв. собственным значен. $\downarrow$ $\alpha-1$ $\downarrow$ $\alpha+1$

по индукции можно доказать $a^+a\,a^n|\alpha\rangle = (\alpha-n)a^n|\alpha\rangle$

т.е. все $a^n|\alpha\rangle$ – собств. ф-ции a^+a

но при больших n, собств. знач. $(\alpha-n) < 0$, что противоречит ①

Отсюда следует утв. ③

③ $\exists\, |vac\rangle, |0\rangle, |g.s\rangle$, такая, что a – понизит $|0\rangle$ – ф. тождественного нуля

$a|0\rangle = 0$, т.е. чтобы не было противоречия α – должно быть целое

1-е состояние: $a^+|0\rangle = |1\rangle$, все высшие состояния могут быть вычислены по индукции $|n\rangle \sim (a^+)^n|0\rangle$

$p]$ =

Пример: $x\langle 0|x\rangle$

$\langle 0|0\rangle = 1$

$a|0\rangle = 0 \to (\hat{x} + i\hat{p})\Psi_0(x) = 0$

$(-\frac{\partial}{\partial\xi} + \xi)\Psi_0(\xi) = 0$, т.е. $\Psi_0 = e^{-\frac{\xi^2}{2}}$

$1 = \int|\Psi|^2 d\xi = \int e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi}$

$\Psi_0 = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\frac{\xi^2}{2}}$

Какая ~~ф-ция~~ (a^+) нормир. ч $\downarrow$ $(a^+)^n|0\rangle$? $\langle 0|a^n(a^+)^n|0\rangle = ?$

Подействуем a на $|n\rangle$

$a|n\rangle \sim |n-1\rangle$ и пусть состояние $|n-1\rangle$ – нормированное, т.е. $\langle n-1|n-1\rangle = 1$

$\langle n-1|n-1\rangle = 1$

$\| a|\alpha\rangle \|^2 = \langle\alpha|a^+ a|\alpha\rangle = \alpha$

$\| a|n\rangle \| = \sqrt{n}$, т.е. $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$

$a|n\rangle \sim |n-1\rangle$

$a|n\rangle = k\,|n-1\rangle$ $\boxed{k = ?}$

Берём норму:

$\sqrt{n} = k \cdot 1 = k \Rightarrow \boxed{k=\sqrt{n}}$

$a^+|n-1\rangle = \sqrt{n}\,|n\rangle$

Ур-ние для вакуума

$a|0\rangle = 0$

$a^{+n}|0\rangle = \sqrt{n!}\,|n\rangle$, т.е. $\boxed{|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n|0\rangle}$

Вычислим ср. знач. координаты в состоянии n

$x = \frac{a+a^+}{\sqrt{2}}$ $\quad \bar{x} = \langle n|x|n\rangle = \frac{1}{n!}\langle 0|a^n \frac{(a+a^+)}{\sqrt{2}}(a^+)^n|0\rangle$

$a a^+ - a^+ a = 1$ - коммут. соотношение

Есть цепочки $a^{n+1} a^{+n}$, $a^n a^{+)n+1}$

а все $\langle 0|a^{n+1}(a^+)^n|0\rangle = 0$ и $\langle 0|a^n(a^+)^{n+1}|$

средние, которые содержат разное число операторов a^+ и a равны нулю, т.к.

$\langle 0|a a \underbrace{a^+|0\rangle} - \langle 0|\underbrace{a|0\rangle}_{0} + \langle 0|a a^+ \underbrace{a|0\rangle}_{0} = 0$

т.к. ~~a+b~~

a, ~~б~~ понижающ. опер

a^+ - повыш. операт

т.е. любая $\langle n|m\rangle = \delta_{mn}$

$\frac{1}{\sqrt{n!m!}}\langle 0|a^n (a^+)^m|0\rangle = 0$, если $m \neq n$

Вычислим в вак. состоянии $\overline{x^2} = \int x^2|\psi|^2 dx = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{-\infty} e^{-\xi^2}\xi^2 d\xi$

$\bar{x}^2 = \langle 0|x^2|0\rangle = \frac{1}{2}\langle 0|a^2 + aa^+ + a^+a + a^{+2}|0\rangle = \frac{1}{2}\langle 0|aa^+|0\rangle$

$= \frac{1}{2}\langle 0|a|\overset{1}{1}\rangle = \frac{1}{2}$

$\bar{p}^2 = \frac{1}{2}$

Пример: ~~$\langle n|x|n\rangle$~~ Чему равняется n ф-ция в x предст.

$\langle x|n\rangle = \langle x|\frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n\underset{\uparrow}{|0\rangle} = \sum_{x'}\langle x|\frac{(a^+)^n}{\sqrt{n!}}x'\rangle\underbrace{\langle x'|0\rangle}_{e^{-\frac{\xi^2}{2}}\frac{1}{\sqrt[4]{\pi}}} = |x$

поменяем представление $\sum_m |m\rangle\langle m| = 1$ $\sum_m$

ф-ция основн. состояния.

$\langle\xi|a^+|\xi'\rangle$ $\quad p = -i\frac{\partial}{\partial\xi}$

$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(x - ip) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{\partial}{\partial\xi}\right)$

$(**)$

$\langle\xi|\hat{1}|\xi'\rangle = \langle\xi|\xi'\rangle = \delta(\xi-\xi')$, т.е. $\hat{1}f = \int\delta(x-x')f(x')dx'$

$\frac{\partial}{\partial x}f = \int\delta(x-x')f'(x')dx'$

$\langle x'|\frac{\partial}{\partial x}|x\rangle = -\delta'_x(x-x')$

$\psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}}} \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{\sqrt{2^n}} (\xi + \frac{\partial}{\partial \xi})^n e^{-\frac{\xi^2}{2}}$ $- \varphi_0(x)$ $u(x\ x)$

Орбитальный момент.

В классич. ф-ке A - сохр, если $\frac{dA}{dt} = 0$

$i\hbar |\dot{\psi}\rangle = \hat{H}\psi$

$-i\hbar\langle\dot{\psi}| = \langle\psi|H$

$\langle\dot{\psi}| = \frac{i}{\hbar}\langle\psi|H$

В кв. мех. $\dot{A}$ - оператор произв. по времени.

$$\dot{A} = \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[A, H]$$

$$\langle\dot{A}\rangle = \langle\psi|\dot{A}|\psi\rangle + \langle\dot{\psi}A|\psi\rangle + \langle\psi|A|\dot{\psi}\rangle = \langle\psi|(\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}(HA - AH)$$

Величина A сохраняется, если её оператор коммутирует с оператором гамильтона

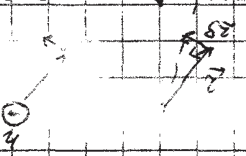
$$\dot{A} = \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[A, H]$$

(*)

$f(x+a) = f(x) + a f'(x) + \ldots + \frac{a^n}{n!} f^{(n)} + \ldots$ операторы имп-са — оператор бесконечно малой трансляции, т.е.

$1 + a\frac{\partial}{\partial x}$ $\qquad p = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$

При повороте все координаты получают приращения. $\delta\vec{r} = [\delta\vec{\varphi} \times \vec{r}]$, т.е.



т.е. $\hat{\vec{L}}\psi = \psi(\vec{r} + \delta\vec{r}) - \psi(\vec{r})$, по аналогии с (*).

$$\hat{\vec{L}} = [\vec{p} \times \vec{r}] = -i\hbar[\nabla \times \vec{r}]$$

$L_x = z p_y - y p_z$ $\qquad \{p_i\, x_k\} = \delta_{ik}$

$x_0\ y_0\ z_0$

$p_x\ p_y\ p_z$

$x\ y\ z$

$L_y = x p_z - z p_x$

$L_z = y p_x - x p_y$

Сопряжение:

1) $L \to L^+ \to (\varphi, A\psi) = (A^+\varphi, \psi)$, то A^+ — эрмитово сопряж.

сопряж. по эрмиту.

если $\hat{A} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ $\qquad$ Если $L = L^+$ — то это самосопряж. по эрмиту

$$\int \varphi^*(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\psi dx = \int(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\varphi)^* \psi dx = (A^+\varphi, \psi)$$

$(\varphi, A\psi)$

при интегрировании по частям возникает подстановка $\Big|_{-\infty}^{+\infty}$ — должна спадать.

Необходимо

Для ф-ции сплошного спектра. $\lim_{\lambda \to 0}(e^{ikx - \lambda|x|})$ → все ф-ции спл спектра.

придают смысл расход. ~~сходящимся~~ $\int$.

$$\int e^{ikx}dx = \lim_{\lambda \to 0}\int_0^{\infty} e^{ikx - \lambda x}dx + \int_{-\infty}^{0} e^{ikx + \lambda x}dx =$$

$$= 2\pi\delta(k)$$

Орбитальный момент

Ландау Лифшиц

$$\Psi(\vec r+\delta\vec r) = \Psi(\vec r) + \delta\vec r\cdot\nabla_r\Psi(r) + \ldots = [1+\underset{\uparrow}{\delta\vec r\,\nabla_r}]\Psi = \{1+([\delta\vec\varphi\times\vec r]\nabla_r)\}\Psi =$$

оператор бескон. малого поворота

$$\delta\vec r = [\delta\vec\varphi\times\vec r]$$

оператор бесконечно малого вращения

$$= \left\{1+\frac{i}{\hbar}(\delta\vec\varphi\cdot\vec L)\right\}\Psi, \text{ где}$$

$$[\vec r,\vec p] = \begin{vmatrix} \vec x_0 & \vec y_0 & \vec z_0 \\ x & y & z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix} =$$

$\hat L = -i\hbar[r,\nabla_r]$ – оператор момента имп-са

Если $\hat L$ - сохраняется, то $\hat H$ инвариантен по отношению к вращению, т.е. $\hat R\hat H\Psi = \hat H\hat R\Psi$, т.е.

оператор вращения

$\{\hat R,\hat H\}=0$ – $\hat R,\hat H$ - коммутируют

$$\dot{\hat A} = \frac{\partial A}{\partial t}+\frac{i}{\hbar}[\hat H,\hat A]$$

Коммутационные соотношения для оператора момента

Будем мерить в единицах $\hbar$

$$l_x = yk_z - zk_y$$
$$l_y = z\cdot k_x - x\cdot k_z$$
$$l_z = xk_y - yk_x$$

y, x, k_z – коммутируют

$$l_xl_y-l_yl_x = \underbrace{yk_z\,zk_x} - yk_z\,x\,k_z - zk_y\,z\cdot k_x + zk_y\,x\cdot k_z -$$
$$-(zk_x\,yk_z - zk_x\,zk_y - xk_z\,yk_z + \underbrace{xk_z\cdot zk_y})$$

$$yk_zzk_x\Psi = y\underbrace{k_z\dot z}_{-i}k_x\Psi + yk_zzk_x\dot\Psi = \cancel{yk}$$

т.е. $l_xl_y-l_yl_x = -i(yk_x-xk_y) = +il_z$

$x \curvearrowright y$
z

$$\begin{cases} l_xl_y-l_yl_x = il_z \\ l_yl_z-l_zl_y = il_x \\ l_zl_x-l_xl_z = il_y \end{cases}$$
– операторы проекций момента не коммутируют между собой.

Если операторы коммутир. – у них собств. система ф-ций, т.е. операторы в этом базисе диагональны, т.е. величина имеет определённое значение

Вычислим

$\{\vec l\,\vec r\} = ?$ $\qquad\{l_x x\} = 0$ $\quad\{l_x$ - содержит $\frac{\partial}{\partial y}$ и $\frac{\partial}{\partial z}\}$

$\{\vec l,\vec p\} = ?$ $\qquad\{l_x y\} = iz$

$\{l_x z\} = -iy$

$$\{l_m x_n\} = e_{mnj}x_j\cdot i$$

единичный антисимметр. тензор.

$$\boxed{[\vec a\,\vec b] = e_{ikl}a_kb_l}$$

Бинарная операция на мн-ве X ∨ паре объектов из м-ва X ставится в соответствие эл-т X.

~~Операция~~

$\{l_x\ l_y\} = i K_z$ и $\{l_m, K_n\} = i\, l_{mnj} K_j$ и $\{l_m, p_n\} = i\, l_{mnj} P_j$

~~Опр~~

Оператор квадрата момента импульса

$l^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2$

$l_x l^2 - l^2 l_x = l_x l_y^2 + l_x l_z^2 - l_y^2 l_x - l_z^2 l_x = (*)$

$$+\begin{cases} l_x l_y^2 - l_y l_x l_y = i l_z l_y \\ l_y l_x l_y - l_y^2 l_x = i l_y l_z \end{cases} \rightarrow l_x l_y^2 - l_y^2 l_x = i(l_z l_y + l_y l_z)$$

Замена $z \rightleftarrows y$ - не цикл-ческая $x \rightleftarrows x$

Аналогично: $l_x l_z^2 - l_z^2 l_x = -i(l_y l_z + l_z l_y)$

значит $(*) = 0$.

т.е. в качестве базисных ф-ций оператора момента можно выбрать базисную ф-цию l^2 и одну из проекций, например z

Часто вводят операторы $l_\pm = l_x \pm i l_y$ - повышающие и понижающий операторы.

Док-ть

$\{l_+ l_-\} = 2 l_z$, $\{l_z l_+\} = l_+$ $\{l_z l_-\} = -l_-$

$$l^2 = l_+ l_- + l_z^2 - l_z = l_- l_+ + l_z^2 + l_z$$

$\{l^2 l_z\} = 0$ - т.е. у них общая с-ма собств. ф-ций

l^2, l_z $|l, m\rangle$, m - собств. число оператора l_z

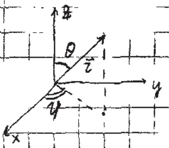
l - собств. число оператора l^2.

$l_z |l, m\rangle = m |l, m\rangle$

~~Поскольку~~

Операторы момента в сферической системы координат

$l_\pm = l_x \pm i l_y$ – мы ввели это на прошлой лекции $\overset{x\,y}{z}$



$x = r \sin\theta \cos\varphi$
$y = r \sin\theta \sin\varphi$
$z = r \cdot \cos\theta$

$l_x = y K_z - z K_y$ $\qquad K_z = -i\frac{\partial}{\partial z}$

Общее правило

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial \varphi}\frac{\partial \varphi}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial \theta}\frac{\partial \theta}{\partial z}$$

$\frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial x}$ - аналогично.

$r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$ $\qquad \frac{\partial r}{\partial z} = \frac{z}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}$

$tg\,\varphi = \frac{y}{x}$, $\sin\varphi = \frac{y}{\sqrt{x^2+y^2}}$

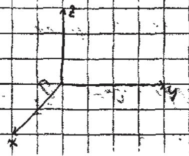
$ctg\,\theta = \frac{z}{\sqrt{x^2+y^2}}$

Ответ:

$l_z = -i\frac{\partial}{\partial \varphi}$

$l_x = i\left(\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + ctg\theta \cdot \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$

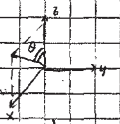
$l_y = -i\left(\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - ctg\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$



$l_z = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}$ - должен быть оператор вращения вдоль оси z.

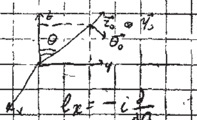
! В операторах нет координаты r

при $\varphi = 0$



$l_y = -i\frac{\partial}{\partial\theta}$

при $\varphi = \frac{\pi}{2}$



$l_x = -i\frac{\partial}{\partial\theta}$

а для

$$l_\pm = l_x \pm i l_y = e^{\pm i\varphi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\,ctg\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$\hat{l}^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2 = l_+ l_- + l_z^2 - l_z = ?$$

Ответ. $l^2 = -\left[\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right] = -\nabla_{\theta,\varphi}$

Оператор момента коммутирует с $\hat{H}$, тогда $\hat{H}$ - инв относительно преобразования поворота, т.е. обладает сферической симметрией.

т.к.

$$\Delta = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{l}^2}{r^2}$$

Вычисление собственных чисел и собственных ф-ций операторов $\hat{l}^2$ и l_z

Эффект Бом-Ароно.

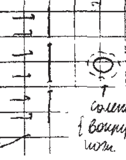
① $l_z = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}$ $|l,m\rangle$

$l_z|l,m\rangle = m|l,m\rangle$

$\hat{l}^2|l,m\rangle = C_{l^2}|l\,m\rangle$

l^2 - собств. число кв. момента

$-i\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} = m\psi \rightarrow \psi \sim e^{im\varphi}$



соленоид бескон. длинный.
{вокруг б. высокий пот. барьер → эл-ны не проникают}

e^- - чувствуют ток, который течет внутри соленоида.

e^- - дифрагируют на $\vec{A}$ векторном потенциале

из требования однозначности волновой ф-ции
откуда оно берется?

Внешний критерий

$$A_\varphi = \frac{\Phi}{2\pi r}$$

$$\int A_\varphi dl = \iint B\,dS$$

$m = 0, \pm1, \pm2, ..$ - из требов. однозначности

$\psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$ - ф-ция определ. момента

но $e^{i\varphi} + e^{-i\varphi} = |m=1\rangle + |m=-1\rangle$

если у вас есть состояние, то вы должны разложить ф-цию по собств. ф-циям оператора момента

с вероятностью $\frac{1}{2} \rightarrow |m=1\rangle$

$\frac{1}{2} \rightarrow |m=1\rangle$

$\{H, l\} = 0$! Энергия не зависит от m → вырождение по m

② Найдем собств. ф-ции оператора $\hat{l}^2$

$l_z \underbrace{l_\pm|l,m\rangle}_{\leftarrow \text{состояние}} =$

$= l_\pm m|l,m\rangle \pm l|m\rangle =$

$= l_\pm(m\pm1)|l,m\rangle$

$\{l_z l_\pm\} = \pm l_\pm$ $l_z l_\pm = l_\pm \cdot l_z \pm l_\pm$

$\{l_+ l_-\} = 2l_z$

в результате действия l_z на ф-цию $l_\pm|l\,m\rangle$ получается $(m\pm1)\,l_\pm|l,m\rangle$, т.е.

$l_+|m\rangle \sim |m+1\rangle$

$l_-|m-1\rangle \sim |m-1\rangle$

$$\begin{cases} l_z|m\rangle = m|m\rangle \\ l_z|m+1\rangle = m+1|m+1\rangle \end{cases}$$

$L^2 - L_z^2 = L_x^2 + L_y^2$ число m ограничено и сверху и снизу.

$m_{max} = |m| = l$

$m_{min} = -|m| = -l$

Пусть $|l,m\rangle$ соответствует L^2, меняя m, получаем l_z - меняется

но $L^2 - L_z^2 = L_x^2 + L_y^2 \rightarrow$ полож. определенная.

т.е. $m \leq m_{max} \longrightarrow$ $l_+|m_{max}=l\rangle = 0$

$l_-|m_{min}=-l\rangle = 0$

$-l \leq m \leq +l$

$2l+1$ - значение.

$$\cancel{\int \psi_n^* \hat{A} \psi_m dx}$$

$$\cancel{l^2 = l_+ l_-} \qquad l_- l_+ = l^2 - l_z^2 - l_z$$

$$l^2 = l_- l_+ = \qquad l^2 = l_- l_+ + l_z^2 + l_z$$

$l_+ |l, l\rangle = 0$ – макс. значение m

$l_- |l, -l\rangle = 0$

$\to l_- l_+ |l, l\rangle = 0$

$|l, l\rangle$ – собств. ф-ция $\hat{l}^2$ и $\hat{l}_z^2$ и, $\hat{l}_z$

$\hat{l}^2 |l, l\rangle = Сч_{l^2} |l, l\rangle$

$\hat{l}_z^2 |l, l\rangle = m^2 |l, l\rangle = l^2 |l, l\rangle$

$l_z |l, l\rangle = m |l, l\rangle = l |l, l\rangle$

т.е. $Сч_{l^2} = l^2 + l = l(l+1)$

т.е. $\hat{l}^2 |l, m\rangle = l(l+1) |l, m\rangle$

$l_z |l, m\rangle = m |l, m\rangle$

Вычислим матричные элементы.

$l_+ |l, m\rangle \sim |l, m+1\rangle$

$l_- |l, m\rangle \sim |l, m-1\rangle$

$\langle l_1, m_1 | A | l_2, m_2\rangle =$

$\langle l' m' | l_z | l, m\rangle = \delta_{l, l'}$

лемма

$\hat{l}\, \psi(\vec{r}) - \psi(\vec{r} + l\, \delta\vec{u}, \vec{r}])$

$$\hat{l}_- \hat{l}_+ = \hat{l}^2 - \hat{l}_z^2 - \hat{l}_z$$

$\overset{\uparrow}{|l, m\rangle}$ т.к. $l^2 - l_z^2 = l_x^2 + l_y^2 \geqslant 0$ – положительно линейный оператор

собвектор $\hat{l}^2$ и $\hat{l}_z$

$\hat{l}_+ |l, l\rangle = 0 \to \hat{l}_- \hat{l}_+ |l, l\rangle = 0$

$\hat{l}^2 - \hat{l}_z^2 - l_z |l, l\rangle = 0$

$Сч_{l^2} = l^2 + l \to l_m^2 = l(l+1) = Сч_{l^2}$

$\langle l, m | \hat{l}^2 = \hat{l}_+ \hat{l}_- + \hat{l}_z^2 - \hat{l}_z | l, m\rangle$

Чему равняется $\langle l, m | \hat{l}^2 | l, m\rangle = l(l+1) \langle l, m | l, m\rangle = l(l+1)$

$\langle l, m | l_+ \overset{\uparrow}{\,} l_- | l, m\rangle = \langle l, m | \hat{l}_+ | l, m-1\rangle \langle l, m-1 | \hat{l}_- | l, m\rangle = (*)$

$\rangle\langle$ вставили един. оператор т.к. $l_- |l, m\rangle \sim |l, m-1\rangle$

$l_\pm = l_x \pm i l_y$ – не эрмитов т.к. стоит i.

$|l\, m\rangle$ – дискретный спектр, если выбрать их в качестве базиса, то эрмитовость будет означать совпадение матриц операторов с транспонированными и комплексно сопряжёнными.

$l_+ = l_-^+$ – ~~комплексно~~ эрмитово сопряженная пара.

т.к. $\langle x|y\rangle = \langle y|x\rangle^*$, то в силу $l_+ = l_-^*$, получаем

$$\langle l,m|\hat l_+|l,m-1\rangle = \langle l,m-1|\hat l_-|l,m\rangle^*$$

l_+l_- т.е. $(x) = |\langle l,m|\hat l_+|l,m-1\rangle|^2$

$$|\langle \underset{\uparrow \atop \text{номер строки}}{m}|l_+|\underset{\uparrow \atop \text{номер столбца}}{m-1}\rangle|^2 = l(l+1) - m^2 - m \leftarrow \hat l_+\hat l_- = \hat l^2 - \hat l_z^2 - \hat l_z$$

$= (l+m)(l-m+1)$ – единств. отл. от нуля матр. эл-т

$l_{+m,m-1} = l_{-m-1,m} = \sqrt{(l+m)(l-m-1)}$

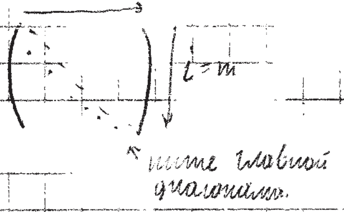
Summary:

$\langle l',m'|l_z|l,m\rangle = \delta_{ll'}\cdot m\cdot\delta_{mm'}$

$\langle l',m|l_+|l,m'\rangle = \delta_{ll'}\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\cdot\delta_{m,m'-1}$

$\langle l',m|l_-|l,m'\rangle = \delta_{ll'}\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\,\delta_{m,m'+1}$

$\langle l',m'|l_z^2|l,m\rangle = l(l+1)\cdot\delta_{ll'}\delta_{mm'}$



δ_{ik} – диагональная матрица

$\delta_{i,k-1}$ – ниже гл. диагонали.

$-l \le m \le l$

$l = 0, 1, 2$ т.е. матрица по $\delta_{ll'}$ – бесконечна

$\underline{l=1}$: ~~при $l=0$~~ $\langle l',m'|l_z^2|l,m\rangle = l(l+1)\cdot\delta_{ll'}\delta_{mm'} = \begin{pmatrix}0&&\\&2&\\&&6\ \ddots\end{pmatrix}$

$$l_+ = \begin{pmatrix}0&0&0\\ \sqrt2&0&0\\ 0&\sqrt2&0\end{pmatrix}$$

$l = \underline{1}$, значит, т.к. $-l \le m \le l$
$m = -1, 0, -1$, то при $m = \underline{-1}$ матричн. эл-ты равны 0

$$l_- = \begin{pmatrix}0&\sqrt2&0\\ 0&0&\sqrt2\\ 0&0&0\end{pmatrix}$$

$$l_x = \frac{l_+ + l_-}{2}$$

$$l_y = \frac{l_+ - l_-}{2i}$$

$\langle m|l_x|m'\rangle = \frac12\left(\delta_{mm'+1} + \delta_{mm'-1}\right)\sqrt{(l+m)(l-m+1)}$ $\qquad l_x = \frac{1}{\sqrt2}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}$

а $l_y = \frac{1}{\sqrt2}\begin{pmatrix}0&-i&0\\ i&0&-i\\ 0&i&0\end{pmatrix}$ т.е. l_x и l_y – эрмитовы

$$l_z = \begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Собственные ф-ции операторов момента в θ и φ представлении

$\langle \theta, \varphi | l, m \rangle = Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ – сферическая гармоника или шаровая ф-ция

$$\hat{l}_z = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$l^2 = -\left[\frac{1}{\sin^2\theta}\cdot\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right]$$ ← угловая часть лапласиана

$$\hat{l}^2 | l, m \rangle = l(l+\underline{1}) | l, m \rangle$$

т.е.

$$\left[\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{\sin\theta}\cdot\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + l(l+1)\right] Y_{l,m} = 0$$ – задача на собств. значения

с другой стороны Y_{lm} – собств. ф-ция l_z:

$$-i\frac{\partial}{\partial\varphi} Y_{l,m} = m Y_{lm} \qquad Y_{lm} = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}\Theta_{l,m}(\theta) = \Phi_m(\varphi)\cdot\Theta_{lm}(\theta)$$

$$\langle l,m | l,m \rangle = \sum_{\theta,\varphi} \langle l,m | \theta,\varphi \rangle \langle \theta,\varphi | l,m \rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \underline{d\theta \cdot Y^*_{lm}}(\theta\varphi)\cdot Y_{lm}(\theta,\varphi)\sin\theta$$

т.к. $d\Omega = d\varphi \sin\theta\, d\theta$.

$$\int |Y_{l,m}(\theta,\varphi)|^2 d\Omega = 1 \qquad d\Omega = \sin\theta \cdot d\varphi\, d\theta$$

! всегда учитывать Якобиан.

$$\int Y^*_{l'm'}(\theta,\varphi) Y_{lm}(\theta,\varphi)\sin\theta\, d\varphi\, d\theta = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

$$\int_0^{2\pi} \Phi^*_m(\varphi)\cdot\Phi_{m'}(\varphi)\, d\varphi = \delta_{mm'}$$

$$\int_0^{\pi} \Theta^*_{lm'}(\theta)\,\Theta_{lm}(\theta)\sin\theta\, d\theta \neq 0 \text{ при } m \neq m'$$ – т.к. $\Theta_{l,m}(\theta)$ – не является собств. ф-цией оператора

$$\overset{\shortparallel}{\delta_{ll'}}$$

т.е. $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ – ортогональны только в смысле $\int$ по обоим углам.

$$\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \to -m^2$$

$$\left[-\frac{m^2}{\sin^2\theta} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + l(l+1)\right]\Theta_{l,m}(\theta) = 0$$

↑ уравнение лежандра → решение полиномы $P_l^m(\cos\theta)$. $\xi = \cos\theta$ $\quad \frac{\partial}{\partial\theta} = -\frac{\partial}{\partial\xi}\sin\theta = \sqrt{1-\xi^2}$

$$\left[-\frac{m^2}{1-\xi^2} + \frac{1}{\cancel{\sqrt{1-\xi^2}}}\sqrt{1-\xi^2}\frac{\partial}{\partial\xi}(1-\xi^2)\frac{\partial}{\partial\xi} + l(l+1)\right]\Theta_{l,m}(\xi) = 0$$

Алгебраическое $\overset{\text{диф}}{\text{ур}}$-ние : 3 особых точки $\xi = \pm 1$, $\xi = \infty$

при целом m и l :

$$\Theta_{l,m} = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \cdot i^{l} \sqrt{\frac{2l+1}{2}} \cdot \sqrt{\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \cdot P_l^m(\xi)$$

где $P_l^m(\xi) = \frac{1}{2^l l!}(1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{\partial^{|m|+l}}{\partial \xi^{|m|+l}} (\xi^2-1)^l$ — присоединенный полином лежандра

$$\int \frac{x^2\, dx}{\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^{2\nu}} = \langle \Psi | U | \Psi$$

$$\frac{1}{\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^{\nu}} \to e^{-\frac{x^2}{a^2}\nu}$$

$$\int \frac{1}{(1+x^2)} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{1}{\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^{\nu}}\, dx = \langle \Psi | T | \Psi \rangle$$

$$\langle \Psi_T | H | \Psi_T \rangle = \langle \Psi_n | H | \Psi_n \rangle - \mathcal{D} \quad \text{где} \quad \mathcal{D} \geq 0$$

Лекция.

Оператор момента — оператор б. м. вращения

$$\hbar \hat{\vec{l}} = -i\hbar [\vec{r}\, \vec{K}]$$

$$\hat{l}_{x,y,z}, \quad \hat{l}^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2$$

l^2, l_z $\quad |l, m\rangle$, так что $\hat{l}_z |l, m\rangle = m |l, m\rangle$

$$\hat{l}^2 |l, m\rangle = l(l+1) |l, m\rangle$$

а. $\langle \theta, \varphi | l, m \rangle = Y_{lm}(\theta, \varphi)$ — ~~[illegible]~~ сферич. гармоники

$$Y_{lm}(\theta) \sim e^{im\varphi} P_l^m(\cos\theta)$$

где $P_l^m(\xi) \sim (1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{\partial^{|m|+l}}{\partial \xi^{|m|+l}} (\xi^2-1)^l \quad \xi = \cos\theta$

через

l_+, l_- $\quad$ в силу $-l < m < l$, то $\left.\begin{matrix} l_+ |l, l\rangle = 0 \\ l_- |l, -l\rangle = 0 \end{matrix}\right\}$ т.к. $\overset{\overset{m}{\shortparallel}}{l+1}$ невозмож

$$l_+ |l, m\rangle \sim |l, m+1)$$

где

$$l_\pm = e^{\pm i\varphi}\left(\pm \frac{\partial}{\partial\theta} + i\, \mathrm{ctg}\,\theta \frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

Получим

$$\langle \theta, \varphi | l, l \rangle = e^{il\varphi}\, \Theta_{ll}(\theta) \quad m,$$

$$\hat{l}_+ |l, l\rangle = 0$$

одно и тоже $\frac{\partial \Theta_{ll}}{\partial\theta} - l \cdot \mathrm{ctg}\,\theta \cdot \Theta_{ll} = 0 \to \frac{1}{\cos\theta}\frac{\partial \Theta_{ll}}{\partial\theta} - \frac{l}{\sin\theta}\Theta_{ll} = 0 \quad \frac{1}{\cos\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} = \frac{\partial}{\partial(\sin\theta)}$

$$\frac{\partial y}{\partial x} - \frac{l}{x} y = 0 \to \frac{dy}{y} = l\frac{dx}{x} \to y = \exp\{l \cos$$

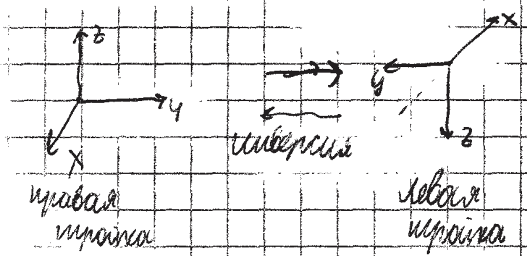
$$\langle \Theta, \varphi | l, l \rangle \sim e^{il\varphi} \sin^l \theta$$

$$\langle l, l | l, l \rangle = 2\pi A^2 \int_0^{\pi} \sin^{2l}\theta\, \sin\theta\, d\theta$$

Оператор $\hat{p}$ - бескон. малый сдвиг в пр-ве
$\hat{\ell}$ - бескон. малого поворота.

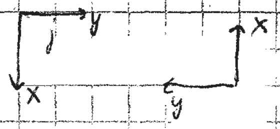
$\hat{P}$ - parity - оператор пространственной инверсии.

Определ: $\hat{P}\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r})$



Сводим. Операция инверсии к повороту определяется размерностью пр-ва:

В 2-мерном - можно:



Можно ввести

$P_{\delta x}\psi(x,y,z) = \psi(-x,y,z)$ - зеркальное отражение

По этому св-ву, если H инвариантен. операции зерк. отражения, то все волн. ф-ции классиф по собств. числу

$P^2\psi(r) = \psi(r)$

$P^2 = 1 \rightarrow$ $p = +1$ - чётные, $p = -1$ - нечётные ф-ции

$[H, L] = 0$ -

$[H, P] = 0$ - чётность

для одновременной измеримости

Необходимо, чтобы $[L, P] = 0$,

но $[L, P] = ?$

$$\hat{L}\hat{P}\psi(\vec{r}) = \hat{L}\psi(-\vec{r})$$

$$\hat{P}\hat{L}\psi(\vec{r}) = \left(\hat{L}\psi(+\vec{r})\right)_{\vec{r}\to-\vec{r}}$$, но $\hat{L} = -i\hbar[\vec{r}, \nabla_r]$

если применить инверсию, то ничего не изменится, т.е.

$[L, P] = 0$

т.е. можно считать

$|l, m, p\rangle$

$$\left.\begin{array}{l} [H, L] = 0 \\ [H, P] = 0 \\ [L, P] = 0 \end{array}\right\}$$ незав. з-ны сохранения

Скаляр - величина, которая при ~~преобраз~~ вращении с. координат не преобразуется

→ истинный $\hat{P}\psi = \psi$

псевдоскаляр $\hat{P}\psi = -\psi$

Вектор - с-ма 3-х скалярных величин которая при вращении с.к. преобразуется как радиус вектор.

→ истинный: компоненты которого при инверсии с.к. меняют знак.

псевдовектор компоненты при инверсии не меняют знак.

Истинный вектор → полярный $\vec{E}$
Псевдовектор → аксиальный – $\overline{H}$

Псевдоскаляр: $(\vec{E}, \vec{B})$

T_{ij} → $\overset{\text{возможна}}{\text{по}}$ первому i – псевдовектор
– по j – псевдо

Тензор – система компонент, которая при вращении с.к. преобразуется как произведение компонент радиуса вектор.

Как ведет себя $\hat{P}|l,m\rangle = ?$
для этого заметим

$\vec{r} \to -\vec{r}$

x = sin θ cos φ
y = sin θ sin φ
z = cos θ

Как это записать в сферич. координатах.

$$r \to r$$
$$\varphi \to \varphi + \pi$$
$$\theta \to \pi - \theta$$

$$Y_{lm} \sim e^{im\varphi} P_l^m(\cos\theta) \to e^{im\varphi + im\pi} P_l^m(-\cos\theta) = e^{i(m+|m|)\pi + il\pi} \to (-1)^l e^{im\varphi} P_l^m(\cos\theta)$$

т.е. ~~l – чётные~~ — P

$l = 2n$ – чётные с-ние
$l = 2n+1$ – нечётные сос-ние.

Сферические гармоники.

$$Y_{lm} \sim e^{im\varphi} P_l^m(\cos\theta)$$
$$P_l^m(\xi) \sim (1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{\partial^{|m|+l}}{\partial \xi^{|m|+l}} (\xi^2-1)^l.$$

Сферические гармоники представляют собой полный набор.

$f(\theta,\varphi) = \sum\limits_{l,m} c_{lm} Y_{lm}(\theta,\varphi)$ – разложение в ряд Фурье.

$$|f\rangle = \sum_{l,m} |l,m\rangle\langle l,m|f\rangle$$

$\hat{L}^2$ – ~~собст~~ оператор квадрата момента $\hat{L}^2 \sim \nabla_{\theta,\varphi}$, т.е. сфер. гармоники – собств. ф-ции $\nabla_{\theta,\varphi}$

В цилиндр. с. координат:

(r, φ, z) – полный набор $e^{im\varphi}$ – цилиндр. гармоники

$f(\varphi) = \sum C_m e^{im\varphi}$, где ~~$f(\varphi)$~~ – периодичная ф-ция

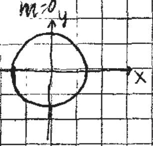
$C_m = C_m^{+}$

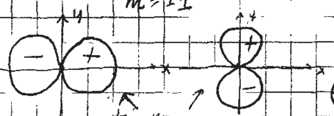
$Y_m(\varphi)$

Y_m, Y_{-m} вместо этой системы выберем $\frac{Y_m + Y_{-m}}{2}$, $\frac{Y_m - Y_{-m}}{2i}$ } невырожд. преобраз.

$Y_0(\varphi) \sim 1$ $\qquad Y_1(\varphi)$ $\quad m = \pm 1$ $\qquad\qquad Y_2(\varphi)$

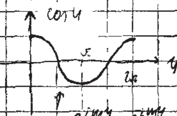
$m=0$

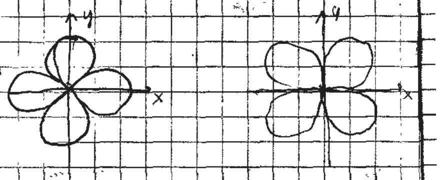




+ – положит.

p





$\cos\varphi = \dfrac{e^{im\varphi} + e^{-im\varphi}}{2}$ $\qquad m \cdot 1$

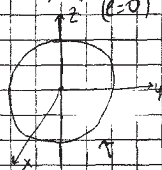
не принадлежит никакому значению m

$$f(\rho,\varphi) = f(\rho) + A(\rho)\cos\varphi + B(\rho)\sin\varphi + A_1(\rho)\cos 2\varphi + B_1\cos\varphi\sin\varphi$$

3-х-мерное обобщение

$|m| \le l$

$Y_{0,0}(\varphi\theta) = 1$ $\quad (l=0)$



$l = 1$

$Y_{1,1}$ $\qquad Y_{10}$ $\qquad Y_{1,-1}$ – восьмерки вдоль каждой из осей

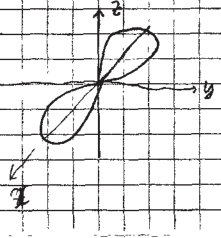
$P_{11} \sim (1-\xi^2)^{\frac{1}{2}} \dfrac{\partial^2}{\partial\xi^2}\xi^2 \sim \sin\theta$

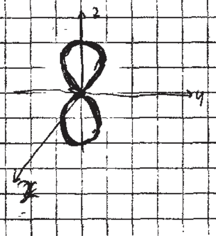
$P_{10} \sim (1-\xi^2)^0 \dfrac{\partial}{\partial\xi}(\xi^2-1) \quad \cos\theta$

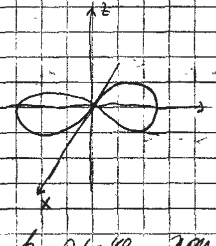
$P_{1-1} \sim \sin\theta$

$e^{i\varphi}\sin\theta \qquad \cos\theta \qquad e^{-i\varphi}\sin\theta$

$Y_{11} + Y_{1,-1} \sim \cos\varphi \cdot \sin\theta$







Разложение по сферич. гармоникам – аналог этому в эл-ке разложение по мультиполям

$\underline{l=2}$ всего из 5

$P_{22} \sim (1-\xi^2)\dfrac{\partial^4}{\partial\xi^4}(\xi^2-1)^2 \sim \sin^2\theta$ $\qquad$ всегда $P_{ll} \sim \sin^l\theta$

$P_{21} \sim (1-\xi^2)^{\frac{1}{2}}\dfrac{\partial^3}{\partial\xi^3}(\xi^2-1)^2 \sim (1-\xi^2)^{\frac{1}{2}}\cdot\xi \sim \sin\theta\cdot\cos\theta$

$P_{20} \sim \dfrac{\partial^2}{\partial\xi^2}\xi^4 - 2\xi^2 \sim 12\xi^2 - 4 \sim 3\xi^2 - 1 \sim 3\cos^2\theta - 1$

$\hat{l}_+ |l,l\rangle = 0$

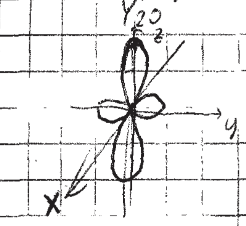
$\left(\dfrac{\partial}{\partial\theta} - l\,\mathrm{ctg}\,\theta\right)\theta_{ll} = 0$

а понижая

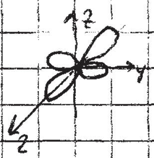
$|l,l-1\rangle \sim \hat{l}_- |l,l\rangle$

можно найти все сферические гармоники

Y_{20} – представляют фигуры вращения отн. оси z, т.е. $m=0$
и зав-сти от φ нет

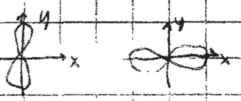


$Y_{2,\pm2} = \cos 2\varphi \cdot \sin^2\theta$ $\qquad$ $Y_{2,\mp2} = \sin 2\varphi \cdot \sin^2\theta$



$Y_{21} = \begin{Bmatrix} \cos\varphi \\ \sin\varphi \end{Bmatrix} \sin 2\theta$

Вид сверху:



!!! Обратить внимание

Осцилляционная т-ма

- ф-ция соответств. основного сост. $l=0$ $m=0$ – не имеет нулей
- с увеличением m – $\overset{\text{кол-во}}{\text{нулей}}$ увеличивается.

$|l,l\rangle = \sin^l\theta$ – сколько имеет нулей?

$0<\theta<\pi$

$Y_{2,0}$ – $\begin{cases} \text{ноль узлов по } \varphi \\ \text{2-узла по } \theta \end{cases}$

$Y_{2,1}$ – $\begin{cases} \text{1 узел по } \varphi \\ \text{2-узла по } \theta \end{cases}$

} проявление осцилляц. теоремы.

Сложение моментов

① и ② не взаимодействуют.

$$\Psi_1(r_1, \varphi_1, \theta_1) = \overset{①}{\Psi_1(\vec{r}_1)} \qquad \overset{②}{\Psi_2(r_2, \varphi_2, \theta_2)} = \Psi_2(\vec{r}_2)$$

Будем рассматривать общую систему

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi_1(\vec{r}_1)\,\Psi_2(\vec{r}_2)$$

$$\int \Psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\,\hat{A}_2\,\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = \int \Psi_2^*(\vec{r}_2)\,\hat{A}_2\,\Psi_2(\vec{r}_2)\,d\vec{r}_2 \cdot \overbrace{\int \Psi_1^*(\vec{r}_1)\Psi_1(\vec{r}_1)\,d\vec{r}_1}^{1}$$

$\vec{L}_1 =$

Введем собств. ф-ции оператора $\hat{L}_1^2$ и $\hat{L}_{1z}$

$\Psi_1(\vec{r}_1)$ – разложим по собств. ф-циям $\hat{L}_1^2$, $\hat{L}_{1z}$

$\Psi_2(\vec{r}_2)$ – разложим по собств. ф-циям $\hat{L}_2^2$ $\hat{L}_{2z}$

$$\Psi_1 \cdot \Psi_2 = \sum_{\substack{l_1 l_2 \\ m_1 m_2}} Y_{l_1 l_2 \cdot m_1 m_2}$$

$$|l_1, m_1\rangle \cdot |l_2, m_2\rangle$$

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi(r_1, r_2, \varphi_1, \theta_1, \varphi_2, \theta_2) = \sum C_{l_1 l_2 m_1 m_2}(r_1, r_2)\,\underbrace{Y_{l_1 l_2, m_1 m_2}(\varphi_1, \theta_1, \varphi_2, \theta_2)}_{\parallel}$$

Раз это система, то оператор $\hat{H}$ не зав. от углов, это значит, что L^2_z. можно определить суммарный момент $\hat{L} = \hat{L}_1 + \hat{L}_2$

т.е. мы должны переразложить поскольку обе системы ф-ций – полный набор

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum C_{L_1 L_2, L, M} \Psi_{L_1 L_2 L M}$$

для $\hat{L}_z = \hat{L}_{1z} + \hat{L}_{2z}$

$M = M_1 + M_2$ но $L^2 \neq L_1^2 + L_2^2$

~~Вс~~

Всего ф-ций $\Psi_{L_1, L_2, M_1, M_2}(\varphi_1, \theta_1, \varphi_2, \theta_2)$ $(2L_1 + 1)(2L_2 + 1)$

а ф-ций $\Psi_{L_1, L_2 L, M}$ – столько же, т.к. обе системы ф-ций – полный набор.

M_1	M_2	M
L_1	L_2	$L_1 + L_2$
L_1	$L_2 - 1$	$L_2 + L_1 - 1$
$L_1 - 1$	L_2	
L_1	$L_2 - 2$	$L_2 + L_1 - 2$
$L_1 - 1$	$L_2 - 1$	
$L_1 - 2$	L_2	

L_1, L_2 – фиксированы.

т.е. $L_{max} = L_1 + L_2$

$$\begin{cases} L = L_1 + L_2 & M = L - 1 \\ L = L_1 + L_2 - 1 & M = L \end{cases}$$

$\overset{(1)}{\Psi_{L_1 L_2 M_1 M_2}}$ $\overset{(2)}{\Psi_{L_1, L_2, L M}}$ Нужно построить

полные наборы

Как называется мн-во пар $\{ |\underset{x_i}{L_1, M_1}\rangle |\underset{y_j}{L_2, M_2}\rangle$ } прямая сумма пр-в

$x_i y_j$ – внешнее произведение

Нам надо разложить ф-ции (1) через (2) → задача сложения моментов.

$\hat{L}_{1z} + \hat{L}_{2z} = \hat{L}_z$ и ~~Мо~~ $\hat{L} = \hat{L}_1 + \hat{L}_2$, но

тогда $M_1 + M_2 = M$ $\hat{L}^2 \neq \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2$, ~~на~~ мы хотим разложить по собств. ф-циям $\hat{L}$

Пусть $L_1 \geq L_2$

M_1	M_2	M	Возможные L
L_1	L_2	L_1+L_2	$L=L_1+L_2$
L_1	L_2-1	L_2+L_1-1	$L=L_1+L_2$; $M=L-1$
L_1-1	L_2		$L=L_1+L_2-1$; $M=L$
L_1	L_2-2		L_1+L_2 $M=L_2-2$ -
L_1-1	L_1-1	$L_1+L_2-\textcircled{2}$	L_1+L_2-1 $M=L_2-1$
L_1-2	L_2	и	L_1+L_2-2 $M=L$

$-L_1 < M_1 < L_1 \rightarrow 2L_1+1$ значения

$L_2 < M_2 < L_2 \rightarrow 2L_2+1$ значения

$(2L_1+1)(2L_2+1)$ - значений

Максимальное значение n при котором

Пусть $L_1=1$ $L_2=1$

	M_1	M_2	M	L
$n=0$	1	1	2	2
$n=1$	1 0	0 1	1	2 1
$n=2$	1 0 -1	-1 0 [illegible]	0	2 1 0
$n=3$	0 -1	-1 0	-1	1 2
$n=4$	-1	-1	-2	2

$L_1-N \geq 0$

$L_2-N \geq 0$

Минимальное значение момента, после которого начинается уравнивание кол-ва значений равно $2L_2$

$5 \rightarrow L=2$

$3 \rightarrow L=1$

$1 \rightarrow L=0$

т.е. кол-во значений M соответств. числу L равно: $(2L+1)$

$$\sum_{\text{возм}} \underset{\text{возм}}{(2L+1)} = (2L_1+1)(2L_2+1) \rightarrow (2L_1+1)(2L_2+1) = 9 = 5+3+1$$

$L_{max} = L_1+L_2$, а $L_{min} = L_1-L_2$

Квантовые числа суммарного момента принимают значения от L_1+L_2 до L_1-L_2

Замечание про чётность $\hat{L} = \hat{L}_1+\hat{L}_2$

$\hat{P}_1$ $\hat{P}_2$ как будет выглядеть $\hat{P}$

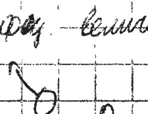
$\hat{P}\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r})$, $\hat{P} = \hat{P}_1 \cdot \hat{P}_2$

Почему у оператора чётности нет классич. аналога?

В классике не было ψ, а и действие оператора чётности соотв. преобраз. ~~того~~ вол. чётности

Если $P_{1,2} = (-1)^{l_1, l_2}$, то $P = (-1)^{l_1+l_2}$

Если физ величина сохраняется, то её опер. коммутир. с $\hat{H}$



Движение в центр-симметр поле

$\hat H = \frac{\hat p^2}{2m} + U(\vec r)$, где $\{\hat L\; U\} = 0$, $U(\vec r)$ – инвариантно относ. вращений

удобно ввести сфер. с коорд.

$p = -i\hbar\nabla$, где $\hat p^2 = -\hbar^2\Delta$

$$\Delta = \left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat l^2}{r^2}\right)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat l^2}{r^2}\right) + U(r)\right]\Psi = E\Psi$$

Найти $\Psi = \sum_{m,l} R_{l,m}(r)\cdot Y_{lm}(\theta,\varphi)$

$\hat l^2 Y_{lm} = l(l+1)Y_{lm}$ – не зав. от m.

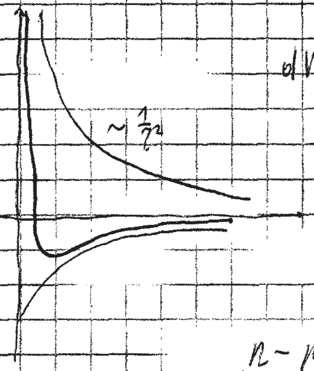
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) + U(r)\right]R_{l\cancel{m}}(r) = E\,R_{l\cancel{m}}$$

Состояниями с разными значениями m соответствует одному l →

Следует найти $R_l(r)$, удовлетворяющие условиям $R_l(r\to\infty) = 0$ и $R(r\to 0)$

$U_{eff} = U + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}$

$\int|\Psi|^2\,dx\,dy\,dz$



Нормировка ф-ций.

$dV = dx\,dy\,dz = r^2\underbrace{\sin\theta\,d\varphi\,d\theta}_{\text{телесн.}}\,dr$

$\int_0^{+\infty} R^2(r)\,r^2\,dr$ – нормировочный интеграл → конечен для дискретного спектра

$$\int_0^{+\infty} R_{l_{n_1}}(r)\,R_{l_{n_2}}(r)\,r^2\,dr = \delta_{n_1 n_2}$$

n – радиальное кв. число → нумерует радиальные ф-ции.

Сведение сферической задачи к [illegible].

$$R(r) = \frac{\chi(r)}{r}$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\frac{\chi(r)}{r} = \frac{1}{r}\frac{\partial^2\chi}{\partial r^2}$$

тогда $\frac{1}{r}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\chi}{\partial r^2} - \frac{(l+1)l}{r^2}\chi\right) + U\cdot\chi(r)\right\} = E\chi(r)$

$\int_0^{\infty}\chi_{n_1}\chi_{n_2}\,dr = \delta_{n_1 n_2}$ – нормировка для χ

Исследуем асимптотики решения при $r\to 0$ и $r\to\infty$

Свободное движение: $u \equiv 0$.
(сферические волны).

$$\chi'' - \frac{l(l+1)}{r^2}\chi = 0$$

вид
↓
$r^s = \chi(r)$
т.е.

$$s(s-1) = l(l+1) \rightarrow s = l+1, \quad s = -l$$

$$\chi(r) = C_1 r^{l+1} + C r^{-l}$$

$$\chi(r) = C_1 r^{l} + C r^{-(l+1)}$$

$$\chi = e^{\pm i\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}} \leftarrow \chi'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\chi = 0$$

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{A}}\Psi =$$

$$\hat{A}\Psi = \varphi$$

1) $\hat{A}^n\Psi = \overbrace{\hat{A}\cdot A \ldots A}^{n}\Psi$ – степень определена

$f(\hat{A}) = \sum_n^{\infty}\frac{f^n}{n!}\hat{A}^n$ ← определение ф-ции от оператора

единств. требование $f(\hat{A})\Psi$ – сходится.

2) $\vec{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_3 \end{pmatrix} \Rightarrow f(\vec{x}) = \begin{pmatrix} f(x_1) \\ f(x_2) \\ f(x_3) \end{pmatrix}$

Пример: ~~$\dot{y} = f(y)$~~ $\quad y_i = f_i$

1-й $\dot{y} = \lambda y$ $\longrightarrow$ $y = Ce^{\lambda t}$

n-мерный: $\{\dot{y}_i = \lambda y_i\}$

$\ddot{\varphi}$

↓

$y_i = c_i e^{\lambda_i t}$

↓

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 e^{\lambda_1 t} \\ c_2 e^{\lambda_2 t} \\ c_3 e^{\lambda_3 t} \end{pmatrix}$$

$$\dot{\vec{y}} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix}\vec{y}$$

$$\lambda \qquad y = e^{\hat{\Lambda} t}$$

т.е. $e^{\begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix} t} = \begin{pmatrix} e^{\lambda_1 t} & & \\ & \ddots & \\ & & e^{\lambda_n t} \end{pmatrix}$

если $\dot{y}_i = \sum C_{ij} y_j \quad e^{\lambda t}$ – вид решения.

$\lambda y_i - \sum_j C_{ij} y_j = 0$, → имеет решение при $\det\|C_{ij} - \lambda\delta_{ij}\| = 0$

↓
найдем собств. вектора и собств. числа этой матрицы

$$f(\hat{A}) = S f(S^{-1}AS) S^{-1}$$

$\hat{A}$ Пусть $A_{diag} = S^{-1}AS$ – диагональный оператор.

Проверим совпадение определений:

$$\frac{f^n}{n!}\hat{A}^n = S\frac{f^n}{n!}(S^{-1}AS)^n S^{-1}$$

$$S^{-1}A\underbrace{S \cdot S^{-1}}_{1}AS \ldots S^{-1}AS =$$

т.е. $e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} =$

$\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi$ – в этом базисе

Матричные элементы.

$$\langle n'|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|n\rangle = \delta_{nn'}e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_1 & \\ & E_n \end{pmatrix} = \delta_{nn'} E_n$$

Решение методом разложения Ψ по стацион. Ψ_n ф-ция оператора $\hat{H}$ т.е.

$$\Psi = \sum_n C_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \Psi_n(x)$$

Эти же запись:

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

$$\Psi = \sum_{n'} \langle n | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} | n' \rangle \langle n' | \Psi \rangle$$

Движение частицы в центральном поле.

Напоминание.

$$E\Psi = \hat{H}\Psi \quad \text{где} \qquad \hat{l}^2 | l, m \rangle = l(l+1) | l, m \rangle$$

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m}\left[-\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{l}^2}{r^2} \right] + U(r)$$

$$\Psi = \sum_{l,m,k} R_{l_k}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \text{ то } \left[-\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) R + \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(U - E) \right] R = 0$$

Значение энергии вырождено по m. $2l+1$ раз

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*_{k,l,n'} \cdot \Psi_{k,ln} r^2 dr \sin\theta \, d\theta \, d\varphi = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{kk'}$$

т.е. $\int R_{kl} \cdot R_{k'l} r^2 dr = \delta_{kk'}$

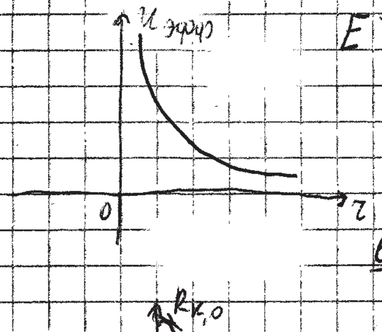
$R = \frac{\chi(r)}{r}$, то ур-ние для χ:

$$-\frac{\partial^2}{\partial r^2}\chi + \frac{2m}{\hbar^2}\Big(\underbrace{U + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}}_{U_{\text{эфф}}} - E \Big)\chi = 0$$

Свободное движение (сферические волны).

$U = 0$

$$-\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} R + \frac{l(l+1)}{r^2} R - \frac{2m}{\hbar^2} E \quad R = 0 \qquad K^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$$

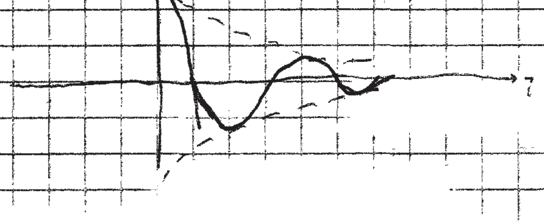


$E > U_{\min} = 0$ – сплошной спектр

$-\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{}$

$$\chi'' + k^2 \chi - \frac{l(l+1)}{2r}\chi = 0$$

$l=0$. $\chi = \begin{cases} \sin kr \\ \cos kr \end{cases}$



необходимо чтобы R - была конечная:

$R \sim \frac{\chi}{r}$, т.е.

$\chi_{k,0} \sim \sin kr$

$R_{k0} \sim \frac{\sin kr}{r}$

$R_{kl}(r\to 0)\sim r^l$

$r\to 0 \quad R_{kl}\sim C_1 r^l + \cancel{C_2 r^{-l-1}}$

при $l\neq 1$: Сделаем замену $R=\frac{u}{\sqrt{r}} = r^{\frac{1}{2}} u(r)$

$-\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} R = -R'' - \frac{2}{r}R'$, т.е.

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

Бессель - это $z'' + \frac{1}{r}z' + \left(k^2 - \frac{n^2}{z^2}\right)z = 0$

$R' = r^{-\frac{1}{2}}u' - \frac{1}{2}r^{-3/2}u$

$R'' = r^{-\frac{1}{2}}u'' - r^{-3/2}u' + \frac{3}{4}r^{-5/2}u$

подставляя в ур-ние

$$r^{-\frac{1}{2}}u'' - r^{-3/2}u' + \frac{3}{4}r^{-5/2}u + \frac{2}{r}\left(r^{-\frac{1}{2}}u' - \frac{1}{2}r^{-3/2}u\right) + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} = 0$$

$$r^{-\frac{1}{2}}\left[u'' + \frac{1}{r}u' - \frac{1}{4}r^{-5/2}u\right] + \left(k^2 - \frac{l(l+1)+\frac{1}{4}}{r^2}\right)u = 0$$

т.е.

$$R\sim r^{-\frac{1}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) = j_l(kr) \text{ - сферические ф-ции}$$

при $l=0$, $j_0(kr)\sim\frac{\sin kr}{r}$

$R'' + \frac{2}{r}R' + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R = 0$

$R = r^l\cdot V$, для V: $v'' + \frac{2(l+1)}{r}v' + k^2 v = 0$

$\downarrow$

продифференцируем

$v''' + \frac{2(l+1)}{r}v'' + k^2 v' - \frac{2(l+1)}{r^2}v' = 0$

$\uparrow$ исключим этот член

т.к. $R' = l r^{l-1}v + r^l v'$

$R'' = l(l-1)r^{l-2}v + 2l r^{l-1}v' + 2l v''$

$l(l-1) + 2l - l(l+1) = 0$

$v' = rW$, тогда.

$W'' + \frac{2(l+2)}{r}W' + k^2 W = 0$

т.е. получаем ~~$R_{k,l+1}\sim\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}R_{kr}$~~

$W\sim\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}v$

$\uparrow$ играет такую же роль

$W\to l+1$

$V\to l$

$R_{kl}\sim r^l\cdot v$

$R_{k,l+1}\sim r^{l+1}\cdot W = r^{l+1}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}v = r^l\frac{\partial}{\partial r}v$

т.е.

$$R_{kl}\sim r^l\underbrace{\left(\frac{1}{kr}\frac{\partial}{\partial r}\right)^l}\frac{\sin kr}{r} \sim j(kr) \quad (33.9) \text{ - ф-ла}$$

$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)$ и т.д. $\hat{}$ оператор

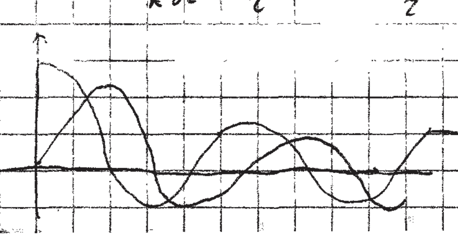
$\frac{1}{k}\frac{\partial}{\partial r}\frac{\sin kr}{r} = \frac{\cos kr}{r} - \frac{\sin kr}{kr^2}$

$v_{l+1} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}v_l$

$v_{l+1} = W$

$R_{k0} = \frac{\sin kr}{r}$

$R_{k1}\sim$



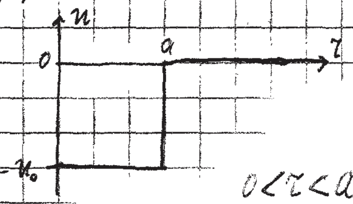
Свободное движение может быть описано разными базовыми ф-циями (лучше, которые диагонализируют $\hat{H}$)

$$\Psi(x,y,z) = \sum_{k_x,k_y,k_z} C\cdot e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

∧ $e^{i\vec{k}\vec{r}} = \langle\vec{r}|\vec{k}\rangle$ мы не разлагали на $\langle\vec{r}|k,l,m\rangle = R_{kl}Y_{lm}$

Движение частицы в потенциальной яме

Сферическая яма.



$$\Psi = R\cdot Y_{l,m}$$

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

$0<r<a$: $R'' + \frac{2}{r}R' + \frac{2m}{\hbar^2}(E+U_0)R - \frac{l(l+1)}{r^2}R = 0$

$r\geq a$: $R'' + \frac{2}{r}R' + \frac{2m}{\hbar^2}ER - \frac{l(l+1)}{r^2}R = 0$

$U_{\text{эфф}} = U + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$

$l=0$: - минимальное значение энергии.

$l=1$:

С ростом l E- возрастает.

$l=0$: $R'' + \frac{2}{r}R' + \frac{2m}{\hbar^2}(E+U_0)R = 0$

$R'' + \frac{2}{r}R' + \frac{2m}{\hbar^2}ER = 0$

Для дискретного спектра:

$$\begin{cases} E+U_0>0 \\ E<0 \end{cases}$$

$$\frac{2m}{\hbar^2}(E+U_0) = k^2$$

$$-\frac{2m}{\hbar^2}E = \ae^2$$

$$R = \frac{\chi(r)}{r}$$

$$\begin{cases} R\sim \frac{\sin kr}{r} & r<a \\ R\sim \frac{e^{-\ae r}}{r} & r>a \end{cases}$$

! Граничные условия должны быть выполнены по χ.

$$\chi'' + \left(E - U - \frac{l(l+1)}{2r}\cdot\frac{\hbar^2}{2m}\right) = 0$$

Центральное поле не зависит от углов и $\hat{H}$ коммутирует с оператором момента.

Потенциальная яма → шар, внутри потенциал $-U_0$, а снаружи 0

$$R'' + \frac{2}{r}R' - \frac{l(l+1)}{r^2}R + \frac{2m}{\hbar^2}\begin{Bmatrix} E+U_0 \\ E \end{Bmatrix}\begin{matrix} \scriptstyle 0<r<a \\ R=0 \\ \scriptstyle r>a \end{matrix}$$

на границе эти ур-ния не работают.

Вывод Г.У. для скалярной ф-ции $\Delta = \operatorname{div} \nabla$

интегрируя ур-ние по малой пов-ти

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)$$

$\rightarrow$ $n \nabla \Psi$ – нормаль (непрерывна)

на Г.У. $\Psi, \Psi'|_{r=a}$ – непрерывна

т.е. Ψ и $(r\Psi)'$ – тоже непрерывны.

Если $\frac{2m}{\hbar^2}(E+U_0) = k^2$
$\frac{2m}{E} = -\varkappa^2$ } дискретный спектр

Внутри $R \sim \begin{cases} j_l(kr) \sim \frac{1}{\sqrt{r}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) \sim r^l\left(\frac{1}{kr}\frac{\partial}{\partial r}\right)^l \frac{\sin kr}{r} \\ \sim \frac{1}{\sqrt{r}} K_{l+\frac{1}{2}}(\varkappa r) \sim r^l\left(\frac{1}{kr}\frac{\partial}{\partial r}\right)^l \frac{e^{-\varkappa r}}{r} \end{cases}$

$k \rightarrow i\varkappa$
$\sin kr \rightarrow i\,\mathrm{sh}\,\varkappa r$

при $r > a$ → волновая ф-ция должна спадать на бесконечности

ФСР можно повернуть невырожд. преобр. и ФСР сохранится в других ф-циях

Ф-ция Макдональда: $y'' + \frac{1}{x}y' - \left(\varkappa^2 + \frac{\nu^2}{x^2}\right) = 0$

Бессель $y'' + \frac{1}{x}y' + \left(k^2 - \frac{\nu^2}{x^2}\right) = 0 \rightarrow J_n, N_n, H^{\pm} = J \pm iN$

при $k \rightarrow i\varkappa$: $\cos kx \rightarrow \mathrm{ch}\,\varkappa x$ $\sin kx \rightarrow i\,\mathrm{sh}\,\varkappa x$

I_n, a $H_n^{\pm}(i\varkappa r) = K_n(\varkappa r)$ Макдональд.

Проследим как появляется уровень в яме при изменении её глубины

самый нижний ур-нь: $l = 0$

$r < a$: $C_1 \frac{\sin kr}{r}$

$r > a$: $C_2 \frac{e^{-\varkappa r}}{r}$

$\Psi|_a$ – непр., т.е. $C_1 \sin ka = C_2 e^{-\varkappa a}$

$(r\Psi)'|_a$ – непр., т.е. $C_1 k \cos ka = -C_2 \varkappa e^{-\varkappa a}$

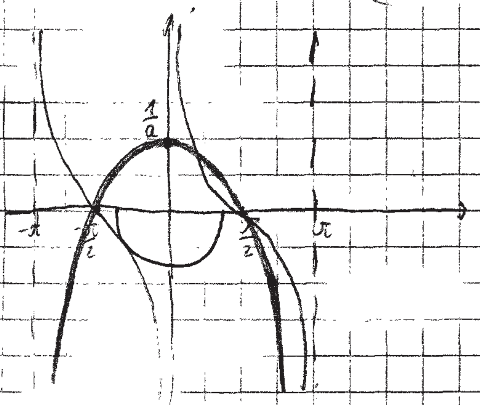
т.е. $k\,\mathrm{ctg}\,ka = -\varkappa$

$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E+U_0)$
$-\varkappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$
$\chi^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E_0$

$k^2 = \chi^2 - \varkappa^2$

$\varkappa^2 = \chi^2 - k^2$

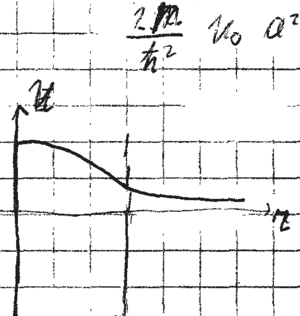
$$(ka)\,\mathrm{ctg}\,ka = -\sqrt{(\chi a)^2 - (ka)^2} = -\sqrt{(\chi a)^2 - (ka)^2}$$



при $a\chi > \frac{\pi}{2}$ – условие существования уровня.

т.е. ∃ корневое значение глубины ямы при которой нет уровней

$$\frac{2m}{\hbar^2} U_0 a^2 > \frac{\pi^2}{4}$$



В одномерной задаче

$\cos kr$ $e^{-\varkappa r}$

при любых значениях

Есть притяжение, но связанного состояния может и не быть

↑

соотношение неопределённости

необходимо, чтобы в яме укладывалось целое число полуволн д.б.

$$\frac{2m}{\hbar^2} U_0 a^2 > \frac{\pi^2}{4}$$

Точное решение

1) свободн. ф.
2) кусочн. пот.
3) 3 D - гармон. осц
4) Кулон

3-х мерный гармонический осциллятор

$$U(r) = \frac{m\omega^2 r^2}{2} = \frac{m\omega^2(x^2+y^2+z^2)}{2}$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 r^2}{2}, \quad r^2 = \vec{r}\,\vec{r} = x^2+y^2+z^2$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + \frac{m\omega^2}{2}(x^2+y^2+z^2)\right]\Psi = E\Psi$$

в сферической с-ме:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R + \frac{m^2\omega^2 r^2}{2} R = ER$$

$$\Psi = R_{(r)} Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

Будем решать в декартовой с. к-т:

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z \qquad H = \frac{p_i^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x_i^2}{2}$$

$$\Psi = X(x)\, Y(y)\, Z(z)$$

$$\hat{H}_x X = \varepsilon_x X \qquad \varepsilon_x = n_x + \frac{1}{2}$$

$$X_n \sim e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi)$$

гл-ное кв число — определяет энергию

ответ.: $E = \varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z = \left(n + \frac{3}{2}\right) = \left(\underbrace{n_x + n_y + n_z}_{} + \frac{3}{2}\right)$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right]\Psi = \varepsilon_x \Psi \qquad \xi = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\, x$$

$$-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{1}{2}\xi^2$$

$\cancel{\Psi \sim e^{-\frac{r^2}{2}}}$, где $r^2 = \xi_x^2 + \xi_y^2 + \xi_z$

$$\Psi \sim e^{-\frac{r^2}{2}} H_{n_x}(\xi_x)\, H_{n_y}(\xi_y)\, H_{n_z}(\xi_z)$$

т.е. $\Psi \sim \langle x, y, z \,|\, n_x, n_y, n_z \rangle$

Сколько ф-ций соответствует 1-му состоянию

$$\Psi_{000} \sim e^{-r^2/2}$$

$1, 3, 6, \ldots \quad \frac{(n+1)(n+2)}{2}$ — степень вырождения

$n = 0\ 1\ 2 \qquad n$

В сферической с-ме координат

$\underline{l=0}$: $R = \frac{\chi}{r}$ → сводится

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\chi + \frac{m\omega^2 r^2}{2}\chi = ER$$

$$(\hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z)\Psi = E\Psi$$

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

$$\Psi_{n_1 n_2 n_3}(x,y,z) \sim e^{-\frac{\alpha r^2}{2}} H_{n_1}(\alpha x) H_{n_2}(\alpha y) \overbrace{H_{n_3}(\alpha z)}^{\text{полиномы Эрмита}}$$

$$0 < n_{1,2,3} < n \qquad \Sigma n_i = n$$

$$E = \hbar\omega\left(\underbrace{n_1 + n_2 + n_3}_{n} + \frac{3}{2}\right)$$

$\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$

Степень вырождения: $dq = \frac{(n+1)(n+2)}{2}$
(degeneracy)

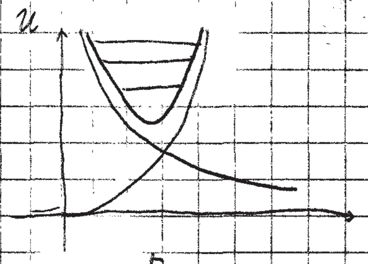
т.е.

$\Psi_{lm,n_r} = Y_{lm}^{(\theta,\varphi)} R_{l,n_r}(r)$, где R удовлетворяет ур-нию:

$$R'' + \frac{2}{r}R' - \underset{\sim\sim}{\frac{l(l+1)}{r^2}} R + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - \underset{\sim\sim}{\frac{m\omega^2 r^3}{2}}\right]R = 0$$

$\frac{\hbar^2}{2m}$

$$U_{eff} = \frac{m\omega^2 r^2}{2} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}$$



Уровни энергии не зависят от того, в какой с-ме координат решается задача.

$E_{n_r,l}$

В кв-ых числах x,y,z гамильтониан не диагонализируется

$\xi = \frac{m\omega}{\hbar} r^2 = \alpha r^2$

$\varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega}$

тогда

~~$m\omega r$~~ $\frac{2m}{\hbar^2}\left[E - \frac{m\omega^2 r^2}{2}\right] = \frac{2m\omega}{\hbar}\left[\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}r^2\right]$

тогда

$$R''_{\sqrt{\xi}\sqrt{\xi}} + \frac{2}{\sqrt{\xi}}R'_{\sqrt{\xi}} - \frac{l(l+1)}{\xi} + 2\left[\varepsilon - \frac{\xi}{2}\right] = 0$$

ГГФ – гипер

ГГФ – гипергеомет. ф-ция

ВГГФ – вырожденная гипергеом. ф-ция

$$\frac{d}{d\sqrt{\xi}} = \frac{d}{\frac{d\sqrt{\xi}}{d\xi}\cdot d\xi} = \frac{1}{\frac{1}{2}\xi^{-\frac{1}{2}}}\frac{d}{d\xi} = 2\xi^{\frac{1}{2}}\frac{d}{d\xi}$$

$$\hat{L} = 4\cdot\xi^{\frac{1}{2}}\frac{\partial}{\partial\xi}\xi^{\frac{1}{2}}\frac{\partial}{\partial\xi} + \frac{2}{\xi^{\frac{1}{2}}}2\xi^{\frac{1}{2}}\frac{\partial}{\partial\xi} - \frac{l(l+1)}{\xi} + 2\varepsilon - \xi \quad \text{, где } \hat{L}R = 0$$

$$\hat{L} = 4\xi\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + 4\xi^{\frac{1}{2}}\cdot\frac{1}{2}\xi^{-\frac{1}{2}}\frac{\partial}{\partial\xi} + 4\frac{\partial}{\partial\xi} - \frac{l(l+1)}{\xi} + 2\varepsilon - \xi =$$

$$= 4\xi\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + 6\frac{\partial}{\partial\xi} - \frac{l(l+1)}{\xi} + 2\varepsilon - \xi$$

Асимптотика при малых ξ:

$\underline{\xi \to 0}$: $\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} - \frac{l(l+1)}{4\xi^2} = 0$ – ур-ние Эйлера

решение ξ^k или

$$C_1\xi^{l/2} + C_2\sqrt{\xi}^{-l-1},$$

нас интересует только регулярное решение т.е. $C_2 = 0$

предположение

$R \sim \xi^{l/2} = \xi^s$, где $s = \frac{l}{2}$

результат $4\xi\frac{\partial}{\partial\xi}\xi^s + \frac{\partial}{\partial\xi}\xi^s$

При ξ^s – решение – подставляем:

$$4s(s-1)\xi^{s-1}+6s\xi^{s-1}-l(l+1)\xi^{s-1}=0$$

$$4s^2+2s-l(l+1)=0$$

$2s=l$ – решение этого ур-ния

нашли асимптотику в нуле.

таким образом, Φ.

$$4\xi R''+6R'-\frac{2s(2s+1)}{\xi}R+[2\varepsilon-\xi]R=0$$

Асимптотика на больших расстояниях:

Предположение $\rightarrow 4\xi R''-\xi R=0$

$\rightarrow R\sim e^{-\frac{\xi}{2}}$, т.е главные члены → где есть ξ

Сделаем замену: $R\sim\xi^s e^{-\xi/2}W$

Сделаем обозначения: $E=\hbar\omega\left[2(n+s)+\frac{3}{2}\right]=\hbar\omega\left(2n_r+l+\frac{3}{2}\right)$

$$\xi W''+\left(2s+\frac{3}{2}-\xi\right)W'+nW=0$$

$2n_r+l=n$

$n_r=$

ВГГ ур-ние: $xy''+(\gamma-x)y'-\alpha y=0$

$y=F(\alpha,\gamma,x)$

→ найдём решение, регулярное в нуле, и на бесконечности возрастает не быстрее, чем полином.

$2s+\frac{3}{2}=\gamma$

$n=-\alpha$, получаем

n_r-

$$xy''+(\gamma-x)y'-\alpha y=0$$

$$y=\sum_{n=0}^{\infty}c_nx^n$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}c_nx^{n-1}n(n-1)+\gamma\sum_{n=0}^{\infty}c_nnx^{n-1}\underbrace{-\sum_{n=0}^{\infty}c_nnx^n-\alpha\sum_{n=0}^{\infty}c_nx^n}_{-c_n(n+\alpha)x^n}=0$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}c_nx^{n-1}n(n-1+\gamma)=\sum_{k=0}^{\infty}c_k(k+\alpha)x^k$$

$n=k+1$

$$c_{k+1}=\frac{k+\alpha}{(k+1)(k+\gamma)}c_k \text{ – разностное ур-ние}$$

$$F(\alpha,\gamma,x)=\sum_{n=0}^{\infty}\underbrace{\frac{\alpha(\alpha+1)\ldots(\alpha+n)}{n!\,\gamma(\gamma+1)(\gamma+n)}}_{=c_n}x^n=\sum_{n=0}^{\infty}c_nx^n$$

Ряд оборвётся, если α – целое отриц. число, т.е.

или $n \in N$

∃ невырожденная геометрическая ф-ция:

$$F(\alpha,\beta,\gamma,x)=\sum\frac{\alpha(\alpha+1)\dots(\alpha+n)\beta(\beta+1)\dots}{n!\,\gamma(\gamma+1)\dots(\gamma+n)}x^{n}$$

↑

$$x(1-x)y''+[\gamma-x(\alpha+\beta+1)]y'-\alpha\beta y=0$$

$$R\sim\xi^{\frac{l}{2}}e^{-\frac{\xi}{2}}F\left(-n_r, l+\frac{3}{2}, \xi\right)$$ и

$$E=\hbar\omega\left(\underbrace{2n_r+l}_{\overset{\uparrow}{\text{главное кв число}}}+\frac{3}{2}\right)$$

$$R\sim r^{l}\exp\left\{-\frac{\alpha r^{2}}{2}\right\}F\left(-n_r, l+\frac{3}{2}, \alpha r^{2}\right)$$

~~Надо до~~ Док-ть, что

каждый уровень $2l+1$ раз вырожден. и ещё есть вырождение, связанное с $n_r = 0, 1, 2, 3$
$l = 0, 1, 2, 3$

$$E=\hbar\omega\left(\underbrace{n_1+n_2+n_3}_{n}+\frac{3}{2}\right)$$

$\frac{(n+1)(n+2)}{2}$ – кратность вырождения.

n_x	n_y	n_z	n_r	l	
0	0	0	0	0	
1	0	0			
0	1	0	0	1	$(2l+1)$
0	0	1			

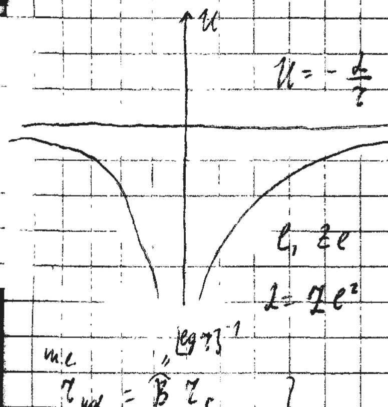
Вырождение, степень которого выше, чем $(2l+1)$ называется случайным
↓
т.е. в системе есть ещё одна симметрия

степень $(2l+1)$ – нормальное вырождение

Кулоново поле (не решается в декартовой сис-ме координат!)

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

$$\Psi=R(r)Y_{l,m}(\theta,\varphi)$$



Обезразмериваем $\frac{m}{\hbar^{2}}\cdot\frac{\alpha}{Z}r^{2}$ } – чтобы это было безразмерное

$\frac{r_{разм}}{1ед.\,r}=r_{безр.}$, т.е. $1\text{ ед }r=\frac{\hbar^{2}}{m\alpha}$

l, Ze

$\alpha=Ze^{2}$

$\frac{mE}{\hbar^{2}}$ [illegible]

$$\varepsilon=\frac{mE}{\hbar^{2}}\left(\frac{\hbar^{2}}{m\alpha}\right)^{2}$$

т.е.

$r_{нов}=\overset{[eg\,r]^{-1}}{\overset{\shortparallel}{\beta}}\,r_{c}$

$\varepsilon_{нов}=\underset{[eg\,E]^{-1}}{\underset{\shortparallel}{\gamma}}\,E_{c}$ }

$$\beta^{2}\left[\frac{\partial^{2}R}{\partial r_{н}^{2}}+\frac{2}{r_{н}}\frac{\partial R}{\partial r_{н}}-\frac{l(l+1)}{r_{н}^{2}}\right]+\frac{2m}{\hbar^{2}}\left[\frac{\varepsilon_{н}}{\gamma}+\frac{\alpha\beta}{r_{н}}\right]R=0$$

Потребуем: $\frac{m}{\beta^{2}\hbar^{2}\gamma}=1$ $\quad\frac{m\alpha\beta}{\beta^{2}\hbar^{2}}=1$

$$\beta=\frac{m\alpha}{\hbar^{2}}=[1\,\text{ед}]^{-1}\quad[1E]^{-1}=\gamma=\frac{\hbar^{2}}{m\alpha^{2}}$$

$$n = \frac{1}{\sqrt{-2\varepsilon}}$$

$$\rho = \frac{2r}{n}$$

$$R'' + \frac{2}{\rho} R' + \left[-\frac{1}{4} + \frac{n}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R = 0$$

при малых ρ $\quad R \sim \rho^l$

при $\rho \to \infty$: $\quad R'' - \frac{1}{4} R = 0$

$R = \rho^l e^{-\frac{\rho}{2}} W$, где для W

$\rho W'' + (2l + 2 - \rho) W + (n - l - 1) W' = 0$ – гипергеометрическое ур-ние

для того, чтобы выбрать регулярные решения в нуле.

$zW'' + (\gamma - z) W' - \alpha W = 0$

$F(1 + l - n,\ 2l + 2,\ \rho)$,

$$F = \sum_k \frac{\alpha(\alpha+1)\dots(\alpha+k)}{k!\,\gamma(\gamma+1)\dots(\gamma+k)} x^k$$

$\downarrow$
т.е. ряд для W должен
т.е. обрываться,
$1 + l - n = n_r \in N$
т.к. l – целое, то
$\underline{\underline{n \in N}}$!

$n = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{рад.} \\ \text{кв число}}}{n_r} + l + 1$ – главное кв число

, т.е. $\boxed{\varepsilon = -\frac{1}{2n^2}}$, где $n \in N$

$0 < l < n-1$
$0 < n_r < n-1$

Определим кратность вырождения уровня

$\varepsilon = \frac{E}{1E} = -\frac{1}{2n^2}$

$1E = R \approx 27$ эВ

	l	n_r		кратность вырождения	
$n = 1$	0	0	$R \sim e^{-\rho/2}$	$g = 1$	
$n = 2$	0	1		$g = 1$	$g = 4$
	1	0		$g = 3$	
$n = 3$	0	2		$g = 1$	$g = 9$
	1	1		$g = 3$	
	2	0		$g = 5$	
$n = 4$	0	3		$g = 1$	$g = 16$
	1	2		$g = 3$	
	2	1		$g = 5$	
	3	0		$g = 7$	

$$g = \sum_{i=0}^{n-1} (2i + 1) = n^2$$

Если есть вырождение, то оно всегда связано с вырождением Гамильтониана

Для основной моды:

$|\Psi(r,\theta,\varphi)|^2 r^2 \sin\theta\, d\varphi\, d\theta\, dr \Rightarrow 4$

Проинтегрируем по углам: $\int_0^\infty \underbrace{4\pi\, |\Psi(r)|^2 r^2}_{\text{плотность вероятности}} dr = 1$

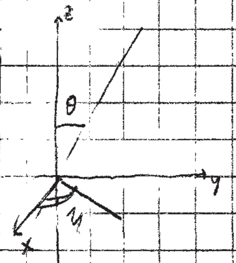
В любой центр.- симм. задаче:

$\Psi = Y_{l,m}(\theta,\varphi)\, R_{l,n_r}(r)$

Рассмотрим сферическую гармонику с определ. l и каким m. и повернем её вращением

$\hat{Z}\, Y_{l,m} = \underbrace{\sum_k C_{mk}\, Y_{lk}}_{2l+1 \text{ слагаемых}}$

$\uparrow$ $2l+1$ – размерность представления



предст

Система ф-ций, которые преобразуются друг через друга называется базисом, а сами коэффициенты называются неприводимыми коэффициентами

$\hat{Z}\, Y_{00} = C_{00}\, Y_{00}$ – т.е. оператор вращения умножает её на ед.

$l=0$ Y_{00}

$l=1$: $Y_{1,-1}$ $Y_{1,0}$ $Y_{1,1}$ (в этом случае любую операцию симметрии можно представить в виде матрицы) $\rightarrow$ собств. ф-ции $\overset{\text{оператора } \hat{l}}{}$ образуют базис неприводимых представлений

Представление группы

$[\hat{Z}, \hat{H}] = 0$

и если $\exists\, \hat{Z}$, то уровни E могут быть вырождены

Каждый уровень оказался вырожден больше чем $(2l+1)$ раз, а именно $\sum_{k=0}^{n-1}(2k+1)$ – значит, существует какая-то неучтённая операция симметрии!

$$A = \frac{\vec{r}}{r} - [\vec{p}, \vec{l}]$$

$$\hat{A} = \frac{\vec{r}}{r} - \frac{1}{2}\left\{[\vec{p}\times\vec{l}] - [\vec{l}\times\vec{p}]\right\} \rightarrow \{\hat{H}, \hat{A}\} = 0$$

! вырожденность связана с симметрией

Теория возмущений.

$\hat{H}\Psi = E\Psi$ – следует решить.

$\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{V}$, где $\hat{H}_0^0\Psi^0 = E^0\Psi^0$ – где решение этой задачи мы знаем

$\hat{V}$ - мало !?

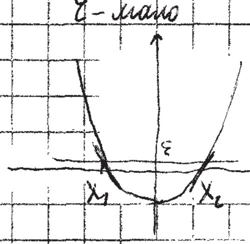
Пример из алгебры:

$(X - X_1^0)(X - X_2^0) = \varepsilon$

и

ε - мало

$X = X_1^0 + \underset{\text{мало}}{\delta}$



$\delta(X_1^0 - X_2^0 + \delta) = \varepsilon$

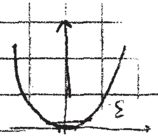
при $\delta << X_1^0 - X_2^0$

$\delta = \frac{\varepsilon}{X_1^0 - X_2^0}$

Если $X_1^0 - X_2^0 << \varepsilon$

$(X - X_1^0)^2 = \varepsilon$

$X = X_1^0 \pm \sqrt{\varepsilon}$



Возмущение, не зависящее от времени

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

$\hat{H}\Psi = E\Psi$ $\quad \hat{H} = \underbrace{\hat{H}_0}_{\text{невозмущённый гамильтониан}} + \boxed{\hat{V}}$ - возмущение

Решение хотим получить в виде возмущений по степеням $\hat{V}$:

$\hat{H}_0\Psi_n^0 = E^0\Psi_n^0$ – знаем решение невозмущённой задачи

Предположения:

1) Дискретность
2) Невырожденность

Ψ_n^0 – образуют ОНБ, т.е. решение можно искать в виде

$\Psi_{(q)} = \sum_m C_m \Psi_m^0(q) \rightleftarrows \langle q|\Psi\rangle = \sum_m \langle q|m\rangle\langle m|\Psi\rangle$

$\langle q|\Psi\rangle = \sum_m \langle q|\Psi_m^0\rangle\langle\Psi_m^0|\Psi\Psi\rangle$

$\underline{\langle q|m\rangle}\,\underline{\langle m|\Psi\rangle}$

$C_m = \langle m|\Psi\rangle$ - волновая ф-ция в m представлении

$\Psi_{(q)}^0 = \langle q|m\rangle$

тогда

$(\hat{H}_0 + \hat{V})\sum_m C_m \Psi_m^0(q) = E\sum_m C_m \Psi_m^0(q)$

$$\sum_m C_m(\hat{H}_0+\hat{V}-E)\Psi_m^0(q)=0 \quad \Big| \; \Psi_k^{0*}(q) \text{ и } \int_{-\infty}^{+\infty} dq$$

$$\hat{H}_0\Psi_m^0(q) = E_m^0\Psi_m^0(q)$$

$$\sum_m\left(C_m(E_m^0-E)\Psi_m^0(q) + C_m\hat{V}\Psi_m^0\right)=0$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_k^{0*}(q)\,\Psi_m^0(q)\,dq \sim \delta_{km}$$

$$\boxed{(E-E_k^0)\,C_k = \sum_m V_{km}C_m}$$

$$\sum_q \langle k|q\rangle\langle q|m\rangle = \delta_{km}$$

уравнение Шредингера в базисе $\Psi^0_{m(q)}$

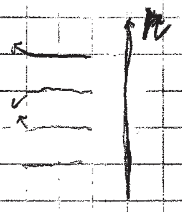
где $V_{km} = \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_k^{0*}(q)\,\hat{V}\,\Psi_m(q)\,dq = \langle k|V|m\rangle$

в дираковских обозначениях

$$(E-E_k^0)\langle k|\underbrace{\Psi}\rangle = \sum_m \langle k|V|m\rangle\langle m|\underbrace{\Psi}\rangle$$

Будем считать, что V_{km} – малы.

Найдем поправку к волновой функ-ции и энергии n-го состояния.



E_n – истинное значение ур-ня энергии после наложения возмущения.

$$E_n = E_n^0 + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \ldots$$

Ψ_n – истинная волновая ф-ция

$$\Psi_n = \sum_m C_{(n)m}\Psi_m^0$$

$$C_{(n)m} = C^0_{(n)m} + C^{(1)}_{(n)m} + C^{(2)}_{(n)m} + \ldots$$

Первый порядок теории возмущений:

$C^{(0)}_{(n)m} = \delta_{mn} \to \Psi_n = \sum_m \delta_{mn}\Psi_m^0 = \Psi_n$

$K = n$: $\quad E_n^{(1)}C^{(0)}_{(n)n} = V_{nn}C_n^0$

номер в ур-нии

уровень к которому ищем поправку

$E_n^{(1)} = V_{nn}$ → дает поправку к энергии

$K \neq n$: $[E_n^{(0)} - E_k^{(0)}]\,C^{(1)}_{n(k)} = V_{kn}$ → дает поправку к волновой ф-ции.

т.к. $(E - E_k^{(0)})\,C^{(1)}_{(n)k} = \sum_m V_{km}\underbrace{C^{(0)}_{(n)m}}$ C_{mn}

т.е.

$$\boxed{\Psi_n^{(1)} = \Psi_n^0 + \sum_{k\neq n}\frac{V_{kn}}{E_n^0 - E_k^0}\Psi_k^0 \;, \quad \text{а } E^{(1)} = V_{nn}}$$

$\Psi_n^{(1)}$ → ~~Исходные~~ ф-ции должны быть нормированы

Второй порядок теории возмущений:

по V порядок возмущения должен совпадать, поэтому.

$\underline{K = n}$ $\quad E_n^{(2)} = \sum_{km} V_{km}C^{(1)}_{(n)m}$

$$C_m^{(1)} = \begin{cases} \frac{V_{mn}}{E_n^0 - E_m^0} & m \neq n \\ 0 & m = n \end{cases}$$, т.е.

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq m} V_{nm} C_m^{(1)}$$

Т-рия возмущения работает при $|V_{kn}| \ll E_n^0 - E_k^0$

возмущение должно быть меньше, чем расст. м/у уровнями

т.е.

$$E_n = E_n^{(0)} + \langle n|V|m\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle n|V|m\rangle\langle m|V|n\rangle}{E_n^0 - E_m^0}$$

$$1 + V + V^2 + V^3 = \frac{1}{1-V}$$

$$E = H_0 + V + V\frac{1}{H_0 - E}V + V\frac{1}{H_0 - E}V\frac{1}{H_0 - E}V$$

$$S_1 \frac{1}{A+B} = \frac{1}{A} - \frac{1}{A}B\frac{1}{A} + \frac{1}{A}B\frac{1}{A}B\frac{1}{A} - \ldots = \frac{1}{A}\left\{1 - B\left[\frac{1}{A} - \frac{1}{A}B\frac{1}{A} + \ldots\right]\right\}$$

где A и B - матрицы

$$S = \frac{1}{A}\{1 - BS\} \rightarrow S = \frac{1}{A+B}$$

Теория возмущений → решение ур-ний

$$(E - E_k^0)C_k = \sum_m V_{km} C_m$$ ← линейная с-ма ур-ний ← ур-ние в базисе Ψ_k^0

$$|k\rangle = \Psi_k^0 : \quad H^0 \Psi_k^0 = E_k^0 \Psi_k^0$$

$$E_n = E_n^0 + E_n^1 + E_n^2$$

$$E\Psi = (H+V)\Psi$$

$$C_k = \delta_{kn} + C_k^{(1)} + C_k^{(2)}$$

$$\Psi = \sum_k \Psi_k^0 C_k$$

$$E_n = E_n^0 + \langle n|V|n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle n|V|m\rangle\langle m|V|n\rangle}{E_n^0 - E_m^0} + \sum_{m \neq n}\sum_{k \neq n} \frac{\langle n|V|m\rangle\langle m|V|k\rangle\langle k|V|n\rangle}{(E_n^0 - E_m^0)(E_n^0 - E_k^0)} - V_{nn}\sum_m \frac{\langle n|V|m\rangle\langle m|V|m\rangle}{E_n^0 - E_m^0} + \ldots$$

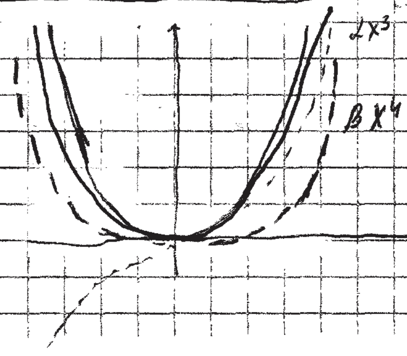
Ангармонический осциллятор.

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{x^2}{2} + \alpha x^3 + \beta x^4$$

$\alpha, \beta \ll 1$

$$\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x_p = x$$

$$\frac{p^2}{m\omega\hbar} = p_0^2$$



$E_n^0 = n + \frac{1}{2}$

$\psi_n^0 \sim e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x)$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} H_n(x) H_m(x) (\alpha x^3 - \beta x^4)\, dx = V_{nm}$$

$x = \frac{a+a^+}{\sqrt{2}}$ $\qquad p = \frac{a-a^+}{i\sqrt{2}}$, тогда $\qquad aa^+ - a^+a = 1$

$a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$

$\hat{H}_0 = a^+a + \frac{1}{2}$ $\qquad a^+|n-1\rangle = \sqrt{n}\,|n\rangle$

$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n |0\rangle$

$$\langle n|V|n\rangle = \frac{\alpha}{2\sqrt{2}} \langle n|(a+a^+)^3|n\rangle + \frac{\beta}{4}\langle n|(a+a^+)^4|n\rangle =$$

$$(a+a^+)^3 = (a+a^+)(a+a^+)(a+a^+) = \cancel{a^3 + 3a^2a}$$

$$= a^3 + a^2a^+ + aa^+a + a^+a^2 + aa^{+2} + a^+aa^+ + a^{+2}a +$$

т.к. $\langle n|a|n\rangle \sim \langle n|n-1\rangle = 0$

$\langle n|a^+|n\rangle \sim \langle n|n+1\rangle = 0$

$\langle n|a^2a^+|n\rangle \sim \langle n|a|n\rangle \sim \langle n|n-1\rangle = 0$

средние будут $+a^{+3}$ отличны от нуля, если степени a и a^+ равны.

$\langle k|a^n a^{+n}|k\rangle \sim \langle k|k\rangle \neq 0$

т.е. $\langle n|(a+a^+)^3|n\rangle = 0$

Члены дающие ненулевой вклад в $(a+a^+)^4$

$$\langle n|aaa^+a^+ + aa^+aa^+ + aa^+a^+a +$$
$$+ a^+aaa^+ + a^+aa^+a + a^+a^+aa|n\rangle = A \; (*)$$

$$\langle n|a^+a^+\underbrace{aa|n\rangle}_{\sqrt{n}|n-1} = \langle n|a^+a^+a\sqrt{n}|n-1\rangle \underset{\text{т.к.}}{=} \langle n|a^+a^+\sqrt{n}\sqrt{n-1}\,|n-2\rangle = n(n-1)$$

$a^+|n-2\rangle = \sqrt{n-1}\,|n-1\rangle$

$\langle n|a^+aa^+a|n\rangle = n^2$

$\langle n|a^+aaa^+|n\rangle = \langle n|a^+a\,(n+1)|n\rangle = (n+1)n$

т.к.

$a^+a|n\rangle = n|n\rangle$

$aa^+|n\rangle = n+1|n\rangle$

$\langle n|aa^+a^+a|n\rangle = \langle n|aa^+\,n|n\rangle = n(n+1)$

$\langle n|a^+a^+aa|n\rangle = \langle n|aa^+\,n|n\rangle = n+1|n$

$\langle n|aa^+aa^+|n\rangle = \langle n|aa^+\,(n+1)|n\rangle = (n+1)^2$

$\langle n|aaa^+a^+|n\rangle = \langle n|aa\sqrt{(n+2)}\overset{\sqrt{n+1}}{|n+2\rangle} = (n+2)(n+1)$

т.е.

$$(*)\; A = \overset{2n^2+2n+1}{\cancel{n^2+3n+2+n^2+2n+1+4n^2+4n = 6n^2+9n}}$$

$$E = \underbrace{E_n^0}_{n+\frac{1}{2}} + \frac{3\beta}{4}(2n^2+2n+1)$$

↖ эквидистантность спектра нарушается.

Поправки 2-го приближения к основному состоянию всегда отрицательны.

$\langle n|a^3|m\rangle = ?$

отличны от нуля только:

$\langle n|a^3|n+3\rangle$ для λx^3:

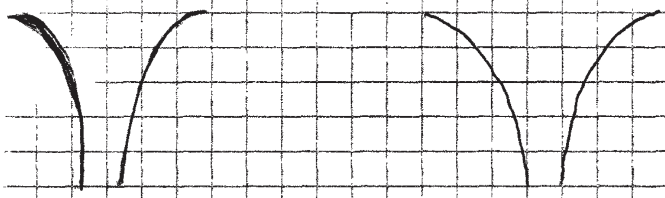
$$\frac{\langle n|V|n-3\rangle\langle n-3|V|n\rangle}{E_n^0 - E_{n-3}^0} + \frac{\langle n|V|n+3\rangle\langle n+3|V|n\rangle}{E_n^0 - E_{n+3}^0} +$$

$$+\frac{\langle n|V|n-1\rangle\langle n-1|V|n\rangle}{E_n^0 - E_{n-1}^0} + \frac{\langle n|V|n+1\rangle\langle n+1|V|n\rangle}{E_n^0 - E_{n+1}^0} \sim \lambda^2$$

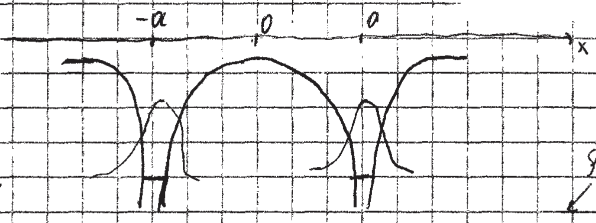
Теория возмущения в случае вырождения

Рассмотрим одномерный атом водорода.

$H = \frac{p^2}{2m} + U(x)$



т.е. $H = \frac{p^2}{2m} + U(x+a) + U(x-a)$



δz – секулярное ур-ние

$(E - E_k^0) C_k = \sum V_{km} C_m$

пусть для $\underbrace{n, n', \ldots}_{N\text{-кратно вырождены}}$ E_n – вырождены

$\Psi_{n_i} = \{\Psi_{n_1}, \Psi_{n_2}, \ \}$ – эти ф-ции соотв. вырожденным уровням линейнонезависимы, но не ортогональны

все ф-ции соответств. 1-му собств. числу n.

$\Psi = \sum_k C_{nk} \Psi_{nk}$

Нужно выбрать такие лин. комбинации, чтобы поправки были малы

$C_{nk} =$

$(E - E_n^0) C_n = \sum\limits_{n'} V_{nn'} C_{n'}$ $E_n = E_n^0 + E_n^1$ $\underset{\uparrow}{E_n^{(1)} C_n^0} = \sum V_{nn'} C_{n'}^0$

однородная с-ма для коэфф. C_n^0, имеет нетрив. реш.

$\det \| E_n \delta_{nn'} - V_{nn'} \| = 0$

$$(E - E_k^0) C_k = \sum_m V_{km} C_m$$

Если уровни невырождены $\left.\begin{matrix} n \\ k=n \end{matrix}\right\}$ $C_k^n = \delta_{km}$

$E_n^{(1)} = E_n - E_n^0 = V_{nn} \rightarrow$ $E_n^{(1)} C_n^0 = V_{nn} C_n^0$

Уровень вырожден.

Если Ψ, E_n - N вырождено

т.е. мы не можем положить все C_n равными 1

$\Psi_n, \Psi_{n'} \ldots \Psi_{nN}$ Можно выбрать

$$\Psi = \sum_k C_{n_k}^0 \Psi_{n_k}^0$$

тогда

$E_{1n} C_n^0 = \sum\limits_{n'} V_{nn'} C_{n'}^0$ - приступая решать

линейная однородная с-ма уравнений имеет нетривиальное решение если $\Delta = 0$

$$\sum_{n'} (V_{nn'} - \delta_{nn'} E_n^1) C_{n'} = 0$$

т.е. $\det \| V_{nn'} - \delta_{nn'} E_n^{(1)} \| = 0$ ← размерность N

$N \{$ $k = 1, \ldots N$

сингулярные ур-ние

$\boxed{\hat{V} C = E C}$ задача на собственные вектора и собств. значения

$E^{(1)} \sim V$

$\vec{C}_k = \{C_{n_k}\} \rightarrow \Psi_1 = \sum C_n^1 \Psi_n^{(0)}$

$\Psi_2 = \sum C_n^2 \Psi_n^{(0)}$

В случае двукратно вырожденного ур-ня

$(E - E_1^0) C_1^0 = V_{11} C_1^0 + V_{12} C_2^0$, $(E - E_2^0) C_2^0 = V_{21} C_1^0 + V_{22} C_2^0$

E_1^0 - двукратно вырожд. ур-ие

$$\begin{cases} E^{(1)} C_1^0 = V_{11} C_1^0 + V_{12} C_2^0 \\ E^{(1)} C_2^0 = V_{21} C_1^0 + V_{22} C_2^0 \end{cases}$$

$$\begin{vmatrix} V_{11} - E^{(1)} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} + E^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \longrightarrow$$

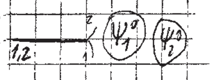
$E^{(1)} = \mathcal{E}$ – обозначение

$$\mathcal{E}^2 - (V_{11} + V_{22})\mathcal{E} + V_{11} \cdot V_{22} - V_{12} V_{21} = 0$$

$$\mathcal{E}^2 - \mathcal{E}\, Sp\, V + \det V = 0$$

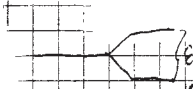
Данному ур-нию соотв.:

$$\mathcal{E}_{1,2} = \frac{V_{11} + V_{22}}{2} \pm \sqrt{\frac{(V_{11} + V_{22})^2}{4} - V_{11} V_{22} - V_{12} V_{21}}$$



Оператор $\hat V$ – эрмитов, значит

$V_{21} = V_{12}^*$ – в силу эрмитовой сопр.



$\}\mathcal{E} \sim V$ – при наложении возмущения вырождение снимается

↑ дуплет

Ищем ф-ции
$$\begin{cases} (V_{11} - \mathcal{E}) C_1^0 + V_{22} C_2^{(0)} = 0 \\ V_{21} C^0 + (V_{22} - \mathcal{E}) C_1^0 = 0 \end{cases}$$

$$C_2^0 = \frac{\mathcal{E} - V_{11}}{V_{12}} C_1^0 \rightarrow C^0_{1,2} \begin{pmatrix} V_{12} \\ \mathcal{E}_{1,2} - V_{11} \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{\sqrt{(\mathcal{E}_{1,2} - V_{11})^2 + V_{12}^2}}$$ – норм

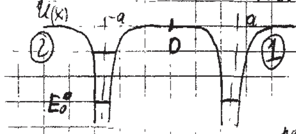
собств. вектора

~~$\Psi^0_{1\,прав} = C_1^0 \Psi^0_{1\,непр} + C_2^0$~~

$$\Psi^0_{1\,прав} = \frac{V_{12}}{\sqrt{(\mathcal{E}_1 - V_{11})^2 + V_{12}^2}} \left[(V_{12} \Psi_1^0 + (\mathcal{E}_1 - V_{11}) \Psi_2^0 \right]$$

$$\Psi^0_{2\,прав} = \frac{1}{\sqrt{(\mathcal{E}_2 - V_{11})^2 + V_{12}^2}} \left[V_{22} \Psi_1^0 + (\mathcal{E}_2 - V_{11}) \Psi_2^0 \right]$$

Задача о 2-х потенц. ямах для электрона.



$$\hat H = \frac{p^2}{2m} + U_0(x-a) + U_0(x+a)$$

$$H\Psi = E\Psi$$

Нулевое приближение: задача об электроне в одной яме.

$\mathcal{E}_0 \approx -13{,}6\,eV = 11600K$

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + U_0(x)$$

$E_0^0 = E^0$ Найдем поправку к уровню E_0^0

$\Psi_1^0 = \Psi_0^0(x-a)$

$\Psi_2^0 = \Psi_0(x+a)$

↖ ↙ волновые ф-ции нулевого приближения

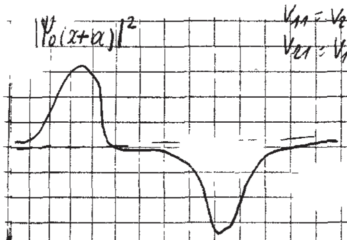
$$V_{11} = \int \Psi_0^*(x-a)\, U_0(x+a)\, \Psi_0(x-a)\, dx$$

$$V_{22} = \int \Psi_0^*(x+a)\, U_0(x-a)\, \Psi_0(x+a)$$

$$V_{21} = \int \Psi_0^*(x+a)\, U_0(x+a)\, \Psi_0(x-a)\, dx$$

$$V_{12} = \int \Psi_0^*(x-a)\, U_0(x+a)\, \Psi_0(x+a)\, dx$$

Интегралы перекрытия (должны существовать)



$V_{11} = V_{22} = s$

$V_{21} = V_{12} = t$

$\varepsilon_{1,2} = s \pm t$

$$\begin{pmatrix} s-\varepsilon & t \\ t & s-\varepsilon \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0$$

$$\begin{pmatrix} -t & t \\ t & -t \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0$$

$C_1^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

$C_2^0 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

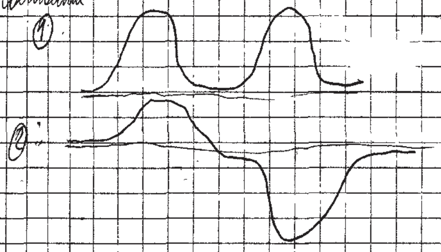
т.е

$$\Psi_1^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\Psi(x+a) + \Psi(x+a)\right)$$

$$\Psi_2^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\Psi(x+a) - \Psi(x-a)\right)$$

Нижнему состоянию должна соответствовать волновая ф-ция без узлов

Состояния



Замечание: при $\tau = 0$ $\quad i\hbar\dot{\Psi} = (\hat{H} + \hat{V})\Psi$, где $\hat{H} + \hat{V} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x-a) + U(x+a)$

$\to \Psi(\tau = 0) = \Psi_0^0(x+a)$

$E_n \Psi_n = H \Psi_n$

$i\hbar\dot{\Psi} = H\Psi \to \Psi = \sum_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}\Psi_n(x)C_n$

$$\Psi = e^{-i\frac{(E_0^0 + s - |t|)}{\hbar}\tau}\left[\Psi_0(x-a) + \Psi_0(x+a)\right]$$

$$\Psi = e^{-\frac{i(E_0+s)}{\hbar}\tau}\begin{cases} C_1 e^{i\frac{|t|}{\hbar}}\left[\Psi_0(x-a) + \Psi_0(x+a)\right] \\ C_2 e^{-i\frac{|t|}{\hbar}}\left[\Psi_0(x-a) - \Psi_0[x+a]\right] \end{cases}$$

из $\tau = 0 \to \Psi(\tau = 0) = \Psi_0^0(x+a)$

$$\sim e^{-i\frac{E_0+s}{\hbar}\tau}\left(\Psi_0(x+a)\cos\frac{|t|}{\hbar}\tau + \Psi_0 \sin\frac{|t|}{\hbar}\tau\right)$$

Возникают биения

Возмущение, зависящее от времени.

$i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi$, где $\Psi = \Psi(q,t)$, q - радиус вектор конфигурац. пр-ва.

$\hat{H} = \hat{H}_0(q) + \hat{V}(q,t)$

$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad \varnothing$

$\Psi(q,t) \to \tilde{\Psi}$

$$\Psi(q,t) = \sum_k a_k(t) \underbrace{\Psi_k^{(0)}(q,t)}_{\psi_k(q)\cdot e^{-i\frac{E_k^{(0)}}{\hbar}t}}$$

→ подставляя это в ур-ние Шредингера,

$\hat{H}_0 \Psi_k^{(0)}(q,t) = E_k^{(0)} \Psi_k(q,t)$

$$i\hbar \sum_k \frac{da_k}{dt} \Psi_k^{(0)}(q,t) + \sum_k a_k(t) i\hbar \frac{\partial \Psi_k^{(0)}}{\partial t} = \sum_k a_k \hat{H}_0 \Psi_k^{(0)}(q,t) + \sum_k a_k(t) \hat{V}(q,t) \Psi_k^{(0)}(q,t)$$

Домножим на $\Psi_m^{(0)}(q)$ и $\int dq$, учтем $\int \Psi_m^{(0)}(q,t) \Psi_k^{(0)}(q,t) dq = \delta_{mn}$

$$i\hbar \sum_k \frac{da_k}{dt} \underbrace{\int \Psi_m^{(0)*} \Psi_k^{(0)} dq}_{\delta_{mk}} = \sum_k a_k \underbrace{\int \Psi_m^{(0)*} \hat{V} \Psi_k^{(0)} dq}_{V_{nk}(t)}$$

$$i\hbar \frac{da_m}{dt} = \sum_k V_{mk}(t) a_k(t)$$

$\omega_{mn} = \frac{1}{\hbar}[E_m^{(0)} - E_k^{(0)}]$

$$V_{mk}(t) = \int \Psi_m^{(0)*}(q,t) \hat{V}(q,t) \Psi_k^{(0)}(q,t) dq = \left\{ \Psi_k^{(0)}(q,t) = \psi_k(q) e^{-i\frac{E_k^{(0)}}{\hbar}t} \right\} = \int \psi_m^*(q) \hat{V}(q,t) \psi_k(q) dq \cdot e^{i\frac{E_m^{(0)} - E}{\hbar}}$$

т.е

$$V_{mk}(t) = U_{mk}(t) e^{i\omega_{mk}t}$$

$a_k(t) = a_k^{(0)} + a_k^{(1)} + \ldots$

$\boxed{t=0}$ $a_k^{(0)} = \delta_{kn}$ $\qquad i\hbar \frac{da_k^{(1)}}{dt} = \sum_k V_{mk}(t) \delta_{kn} = V_{mn}(t)$

$$\Psi_n = \sum_k a_{kn}(t) \Psi_k^{(0)}(q,t)$$

где $\boxed{i\hbar \frac{da_{mn}^{(1)}}{dt} = V_{mn}(t)}$ $\qquad a_{mn}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int V_{mn}(t) dt$

Монохроматическая зав-ть от времени:

$$\left.\begin{aligned} &\hat{V}(qt) = \hat{F} e^{i\omega t} + \hat{G} e^{-i\omega t} \\ &\hat{V} = \hat{V}^+ \\ &\hat{V}^+ = \hat{F}^+ e^{-i\omega t} + \hat{G}^+ e^{i\omega t} \end{aligned}\right\}$$

$$\begin{cases} \hat{F} = \hat{G}^+ \\ \hat{F}^+ = \hat{G} \end{cases}$$

$$\hat{V}(t) = \hat{F} e^{i\omega t} + \hat{F}^+ e^{-i\omega t}$$

$$V_{kn}(t) = F_{kn} e^{i\omega t} + F_{nk}^* e^{-i\omega t}$$

$$F_{kn} = \int \Psi_k^{(0)*}(q,t) \hat{F}(q) \Psi_n^{(0)}(q,t) dq = \underbrace{\int \psi_k^*(q) \hat{F}(q) \psi_n(q)}_{\cancel{F_{kn}}\ F_{kn}} dq \cdot e^{i\omega_{kn}t}$$

$$V_{kn}(t) = F_{kn} e^{i(\omega_{kn} + \omega)t} + F_{nk}^* e^{i(\omega_{kn} - \omega)t} \quad \cancel{\omega_{nk} = -\frac{1}{\hbar}[}$$

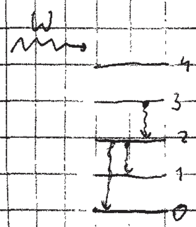
$$-\omega_{nk} = -\frac{1}{\hbar}[E_n^{(0)} - E_k^{(0)}] = \omega_{kn}$$

т.е. $a_{kn}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int V_{kn}(t)\,dt = -\frac{i}{\hbar}\int\left[F_{kn}e^{i(\omega_{kn}+\omega)t} + F_{nk}^{*}\,e^{i(\omega_{kn}-\omega)t}\right]dt =$

$$= -\frac{1}{\hbar}\left[\frac{F_{nk}\,e^{i(\omega_{kn}+\omega)t}}{\omega_{kn}+\omega} + \frac{F_{nk}^{*}\,e^{i(\omega_{kn}-\omega)t}}{\omega_{kn}-\omega}\right]$$

$|a_{kn}^{0}| << 1$

$a_{nn}^{(1)} = 0$



$\int|\Psi|^2 dq = 1$

$\Psi_n^{(0)}(q,t) + \sum_k a_{kn}^{(1)}(t)\cdot\Psi_k^{(0)}(q,t)$

$$\int|\Psi|^2 dq = 1 + \sum_k a_{kn}^{(1)*}\int\Psi_k^{(0)*}\Psi_n^{(0)}dq +$$

$$+ \sum_k a_{kn}^{(1)}\underbrace{\int\Psi_k^{(0)}\Psi_n^{(0)}dq}_{\delta_{kn}} + \sum_{k,k'} a_{kn}^{(1)*}a_{k'n}^{(1)}\cdot$$

$$\cdot\int\Psi_k^{(0)*}\Psi_{k'}^{(0)}dq = 1$$

т.е. $1 = 1 + a_{nn}^{(1)} + a_{nn}^{(1)*} + |a_{kn}^{(1)}|^2.$

$$a_{nn}^{(1)} \sim |a_{kn}^{(1)}|^2$$

Матричные эл-ты физ. величины.

$f : \to \hat{f}(q,t)$

$f_{nm}(t) = \int\Psi_n^{*}(q,t)\,\hat{f}(q,t)\,\Psi_m(q,t)\,dq$ – определение

$\Psi_n(q,t) = \sum_k a_{kn}(t)\cdot\Psi_k^{(0)}(q,t)$ $\qquad a_{kn}(t) = \underbrace{a_{kn}^{(0)}(t)}_{\overset{\shortparallel}{\delta_{kn}}} + a_{kn}^{(0)}(t)$

$\Psi_n(q,t) = \Psi_n^{(0)}(q,t) + \sum_k a_{kn}(t)\,\Psi_k^{0}(q,t)$

$$f_{nm}(t) = \int\Psi_n^{(0)*}(q,t)\,\hat{f}(q,t)\cdot\Psi_m^{(0)}(q,t)\,dq + \underbrace{\int\sum_k a_{kn}^{(1)*}(t)\,\Psi_k^{(0)*}(q,t)\,\hat{f}(q,t)\,\Psi_m^{(0)}(q,t)\,dq + \int\Psi_n^{(0)*}(q,t)\cdot\hat{f}(q,t)\sum_k a_{km}^{(1)}(t)\,\Psi_k^{(0)}(q,t)\,dq}_{\overset{\shortparallel}{f_{nm}^{(1)}(t)}}$$

$$f_{nm}^{(1)}(t) = \sum_k\left[\underbrace{a_{kn}^{(1)*}(t)\,f_{km}^{(0)}(t)}_{f^{(0)}a^{*(1)}} + \underbrace{a_{km}^{(1)}(t)\,f_{nk}^{(0)}(t)}_{f^{(0)}a^{(1)}}\right]$$

$$f_{nm}^{(1)}(t) = \sum_k\left\{f_{km}^{(0)}(t)\cdot -\left[\frac{F_{kn}^{*}\,e^{-(\omega_{kn}+\omega)t}}{\hbar(\omega_{kn}+\omega)} + \frac{F_{nk}\,e^{-i(\omega_{kn}-\omega)t}}{\hbar(\omega_{kn}-\omega)}\right] - f_{nk}^{(0)}(t)\left[+\frac{F_{km}\,e^{i(\omega_{kn}+\omega)t}}{\hbar(\omega_{km}+\omega)} + \frac{F_{mk}\,e^{i(\omega_{km}-\omega)t}}{\hbar(\omega_{km}-\omega)}\right]\right\}e^{\pm i\omega t}$$

$$f_{nm}^{(1)}(t) = -\sum_k\left\{e^{-i\omega t}\left[\frac{F_{kn}^{*}\cdot f_{km}^{(0)}(t)\cdot e^{-i\omega_{kn}t}}{\hbar(\omega_{kn}+\omega)} + \frac{F_{mk}^{*}\cdot f_{nk}^{(0)}(t)\,e^{i\omega_{km}t}}{\hbar(\omega_{km}-\omega)}\right] + e^{i\omega t}\left[\frac{F_{nk}\,f_{km}^{(0)}(t)\,e^{-i\omega_{kn}t}}{\hbar(\omega_{kn}-\omega)} + \frac{F_{km}\,f_{nk}^{(0)}(t)\,e^{i\omega_{km}t}}{\hbar(\omega_{km}+\omega)}\right]\right\}$$

$$f_{nk}^{(0)}(t) = \int\Psi_n^{(0)*}(q,t)\,\hat{f}(q,t)\,\Psi_k^{(0)}(q,t)\,dq = \int\psi_n^{*}(q)\,\hat{f}(q,t)\cdot\psi_k(q)\,dq\cdot e^{i\omega_{nk}t} = f_{nk}(t)\,e^{i\omega_{nk}t}$$

$$f_{nk}^{(0)}(t) = \mathcal{F}_{nk}(t)\, e^{i\omega_{nk}t}$$

$$f_{km}^{(0)}(t)\, e^{i\omega_{kn}t} = \mathcal{F}_{km}(t)\, e^{i(\omega_{km}-\omega_{kn})t} = X_1$$

$$f_{nk}^{(0)}(t)\, e^{i\omega_{km}t} = \mathcal{F}_{nk}(t)\, e^{i(\omega_{nk}+\omega_{km})t} = X_2$$

$$\omega_{km}-\omega_{kn} = \frac{1}{\hbar}\left[E_k^{(0)} - E_m^{(0)} - E_k^{(0)} + E_n^{(0)}\right] = \omega_{nm}$$

$$\omega_{nk}+\omega_{km} = \frac{1}{\hbar}\left[E_n^{(0)} - E_k^{(0)} + E_k^{(0)} - E_m^{(0)}\right] = \omega_{nm}$$

т.е. $X_1 = \mathcal{F}_{km}(t)\, e^{i\omega_{nm}t}$

$X_2 = \mathcal{F}_{nk}(t)\, e^{i\omega_{nm}t}$

$$f_{nm}^{(1)}(t) = -e^{\omega_{nm}t}\sum_k \left\{ e^{-i\omega t}\left[\overbrace{\frac{\mathcal{F}_{kn}^{*} f_{km}(t)}{\hbar(\omega_{kn}+\omega)}}^{\mathcal{F}_{nk} f_{km}(t)} + \overset{f_{nk}(t)\cdot\mathcal{F}_{km}}{\frac{\mathcal{F}_{mk}^{*} f_{nk}(t)}{\hbar(\omega_{km}-\omega)}}\right] + \right.$$

$$\left. + e^{i\omega t}\left[\frac{\mathcal{F}_{nk}\cdot f_{km}(t)}{\hbar(\omega_{kn}-\omega)} + \underbrace{\frac{\mathcal{F}_{km}\cdot f_{nk}(t)}{\hbar(\omega_{km}+\omega)}}_{f_{nk}(t)\,\mathcal{F}_{km}}\right]\right\}$$

$C = B\cdot A$ $\qquad C_{mn} = \sum_k a_{mk}\, b_{kn}$ – симметризованный вид

Задача

$$\omega_{mn} = \frac{1}{\hbar}\left[E_m^{(0)} - E_n^{(0)}\right] \qquad \varepsilon \ll (\omega_{mn}, \omega)$$

$$\omega_{mn} = \omega + \varepsilon$$

Пользоваться теорией возмущений нельзя $\underline{\omega_{mn} = \omega + \varepsilon}$

$$i\hbar\frac{da_m}{dt} = \sum_k V_{mk}(t)\, a_k(t)$$

$$\begin{cases} i\hbar\cdot\dot{a}_m = V_{mm}a_m + V_{mn}a_n \\ i\hbar\dot{a}_n = V_{nm}a_n + V_{nn}a_n \end{cases}$$

$$V_{mk}(t) = \mathcal{F}_{mk}\, e^{i(\omega_{mk}+\omega)t} + \mathcal{F}_{km}^{*}\, e^{i(\omega_{mk}-\omega)t}$$

~~V_{mm}~~ $\qquad \omega_{mm} = 0$

$$V_{mm}(t) = \mathcal{F}_{mm}\, e^{i\omega t} + \mathcal{F}_{mm}^{*}\, e^{-i\omega t}$$

$$?\; V_{mn}(t) = \cancel{\mathcal{F}_{mn}\, e^{i(2\omega+\varepsilon)t}} + \mathcal{F}_{nm}^{*}\, e^{i\varepsilon t}$$

$$V_{nm}(t) = \cancel{\mathcal{F}_{nm}^{*}\, e^{-i(2\omega+\varepsilon)t}} + \mathcal{F}_{nm}\, e^{-i\varepsilon t}$$

пренебрегаем $\sim \frac{1}{\varepsilon} \gg \frac{1}{2\omega}$

$$\begin{cases} i\hbar\dot{a}_m = \mathcal{F}_{nm}^{*}\, e^{i\varepsilon t} a_n \quad \left|\times\frac{d}{dt}\right. \\ i\hbar\dot{a}_n = \mathcal{F}_{nm}\, e^{-i\varepsilon t} a_m \end{cases}$$

$$+i\hbar\ddot{a}_m = i\varepsilon\, \mathcal{F}_{nm}^{*}\, e^{i\varepsilon t} a_n + \mathcal{F}_{nm}^{*}\, e^{i\varepsilon t}\dot{a}_n$$

$$i\hbar\ddot{a}_m = i\varepsilon\cdot i\hbar\dot{a}_m + \mathcal{F}_{nm}^{*}\, e^{i\varepsilon t}\frac{\mathcal{F}_{nm}}{i\hbar}\, e^{-i\varepsilon t} a_m$$

$$\ddot{a}_m = i\varepsilon\dot{a}_m - \frac{|\mathcal{F}_{nm}|^2}{\hbar^2}a_m$$

$V_{mn} =$

$\eta = \frac{\mathcal{F}_{nm}}{\hbar}$

$\ddot{a}_m + i\varepsilon \dot{a}_m - |\eta|^2 a_m = 0 \qquad a_m \sim e^{i\lambda t}$

$$\lambda^2 - \varepsilon\lambda - |\eta|^2 = 0$$

$$\lambda_{1,2} = \frac{\varepsilon}{2} \pm \underbrace{\sqrt{\frac{\varepsilon^2}{4} + |\eta|^2}}_{\Omega} = \frac{\varepsilon}{2} \pm \Omega$$

$a_m = C_1 e^{i\lambda_1 t} + C_2 e^{i\lambda_2 t} \qquad a_n = \frac{i\hbar}{\mathcal{F}^*_{nm}} e^{-i\varepsilon t} \dot{a}_m = \frac{-1}{\eta^*}\left[\lambda_1 C_1 e^{i(\lambda_1 - \varepsilon)t} + \right.$

$\left. + \lambda_2 C_2 e^{i(\lambda_2 - \varepsilon)t}\right]$

$\lambda_{1,2} - \varepsilon = \frac{\varepsilon}{2} - \varepsilon \mp \Omega = -\frac{\varepsilon}{2} \pm \Omega = -\left[\frac{\varepsilon}{2} \mp \Omega\right] = -\lambda_{21}$

$\underline{t=0}$: $\begin{matrix} a_m(0) = 1 \\ a_n(0) = 0 \end{matrix} \Big\| \longrightarrow C_1, C_2 \longrightarrow \begin{cases} C_1 + C_2 = 1 \\ \lambda_1 C_1 + \lambda_2 C_2 = 0 \end{cases}$, $C_2 = -\frac{\lambda_1}{\lambda_2} C_1$

$C_1\left(1 - \frac{\lambda_1}{\lambda_2}\right) = 1$

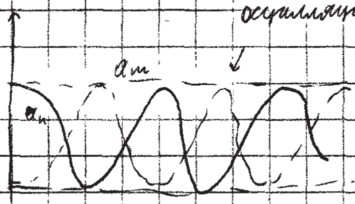
$a_m(t) = \left[\cos\Omega t - \frac{i\varepsilon}{2\Omega}\sin\Omega t\right] e^{i\frac{\varepsilon t}{2}} \qquad C_1 = \frac{\lambda_2}{\lambda_2 - \lambda_1} \quad C_2 = \frac{-\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1}$

$a_n(t) = \frac{i\eta}{\Omega}\sin\Omega t \cdot e^{-i\varepsilon t/2}$

$\underline{\varepsilon = 0}$

$|a_m(t)|^2 = \cos^2|\eta|t$

$|a_n(t)|^2 = \sin^2|\eta|t$



т.е. $\begin{cases} a_m = \frac{1}{\lambda_2 - \lambda_1}\left[\lambda_2 e^{i\lambda_1 t} - \lambda_1 e^{i\lambda_2 t}\right] \\ a_n = -\frac{\lambda_1\lambda_2}{\eta^*(\lambda_2 - \lambda_1)}\left[e^{-i\lambda_2 t} - e^{-i\lambda_1 t}\right] \end{cases}$

~~$a_m = C_1 e^{i\lambda_1 t}$~~

$\lambda_{1,2} = \frac{\varepsilon}{2} \pm \Omega \to \Omega^2 = \frac{\varepsilon^2}{4} + |\eta|^2$

$\lambda_2 - \lambda_1 = \frac{\varepsilon}{2} - \Omega - \frac{\varepsilon}{2} - \Omega = -2\Omega$

$\lambda_2\lambda_1 = \frac{\varepsilon^2}{4} - \Omega^2 = -|\eta|^2$

$$\begin{cases} a_m = \frac{1}{2\Omega}\left[\lambda_1 e^{i\lambda_2 t} - \lambda_2 e^{i\lambda_1 t}\right] \\ a_n = -\frac{|\eta|^2}{\eta^* 2\Omega}\left[e^{-i\lambda_2 t} - e^{-i\lambda_1 t}\right] \end{cases}$$

т.е.

~~$a_m = \frac{1}{2\Omega}\left[\left(\frac{\varepsilon}{2} + \Omega\right)e^{-i\Omega t} + \left(\frac{\varepsilon}{2} - \Omega\right)e^{i\Omega t}\right] e^{i\frac{\varepsilon t}{2}} = \frac{e^{i\frac{\varepsilon t}{2}}}{2\Omega}\left[\frac{\varepsilon}{2}\left(e^{-i\Omega t} + e^{i\Omega t}\right) + \Omega\left(e^{-i\Omega t} - e^{i\Omega t}\right)\right] = \frac{e^{i\varepsilon t/2}}{\Omega}\left[\frac{\varepsilon}{2}\cos\Omega t - i\Omega\sin\Omega t\right] = e^{i\frac{\varepsilon t}{2}}\left[\frac{\varepsilon}{2\Omega}\cos\Omega t - i\sin\Omega t\right]$~~

~~$a_n = -\frac{\eta}{2\Omega}\left[e^{i\Omega t} - e^{-i\Omega t}\right] e^{-\frac{\varepsilon t}{2}}$~~

$a_m(t) = -\frac{1}{2\Omega}\left[\frac{\varepsilon}{2}\left(e^{i\lambda_1 t} - e^{i\lambda_2 t}\right) - \Omega\left(e^{i\lambda_1 t} + e^{i\lambda_2 t}\right)\right] = -\frac{1}{2}\left[\frac{\varepsilon}{2\Omega}\left(e^{i\Omega t} - e^{-i\Omega t}\right)e^{i\frac{\varepsilon t}{2}} - \right.$

$\left. - \left(e^{i\Omega t} + e^{-i\Omega t}\right)e^{i\frac{\varepsilon t}{2}}\right] = -\left[i\frac{\varepsilon}{2\Omega}\sin\Omega t - \cos\Omega t\right] e^{i\frac{\varepsilon t}{2}}$

$a_n(t) = -\frac{|\eta|}{\eta^* 2\Omega}\left[e^{-i\lambda_2 t} - e^{-i\lambda_1 t}\right] = -\frac{\eta}{2\Omega}\left[e^{i\Omega t} - e^{-i\Omega t}\right] e^{-i\frac{\varepsilon t}{2}} = -\frac{i\eta}{\Omega}\sin\Omega t \cdot e^{-\frac{i\varepsilon t}{2}}$

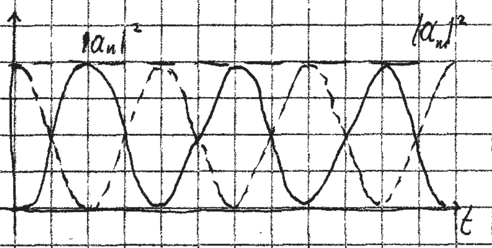
$\underline{\varepsilon=0}$

$$\Omega=\sqrt{\frac{\varepsilon^2}{4}+|\eta|^2}=|\eta|$$

$$a_m(t)=\cos\Omega t$$

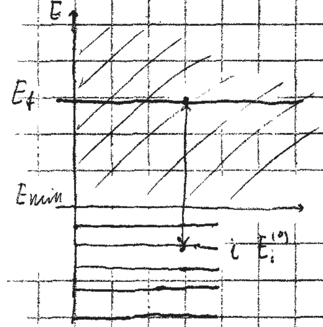
$$a_n(t)=-i\,e^{i\arg\eta}\sin\Omega t$$

$$\eta=|\eta|\,e^{i\arg\eta}$$



Осцилляции Раби.

Переходы в состояниях непрерывного спектра под влиянием период. возмущения.



$$i\hbar\dot{a}_{fi}=V_{fi}(t)$$

$$a_{fi}=-\frac{i}{\hbar}\int_0^t V_{fi}(t)\,dt$$

$$a_{fi}(0)=0$$

$$V_{fi}(t)=\mathcal{F}_{fi}\,e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}+\mathcal{F}_{if}^{*}\,e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}$$

$$\sim\frac{1}{\omega_{fi}+\omega}\ll\sim\frac{1}{\omega_{fi}-\omega}$$

f – набор квантовых чисел

пусть $\underbrace{E_f^{(0)}-E_i^{(0)}}_{\hbar\omega_{fi}}\approx\hbar\omega$

$$a_{fi}=-\frac{i}{\hbar}\mathcal{F}_{fi}\int_0^t e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}\,dt=-\frac{\mathcal{F}_{fi}}{\hbar(\omega_{fi}-\omega)}\left[e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}-1\right]$$

т.к. $\mathcal{F}_{if}^{*}=\mathcal{F}_{fi}$

$$a_{fi}=-\frac{\mathcal{F}_{fi}}{\hbar(\omega_{fi}-\omega)}\,e^{\frac{i(\omega_{fi}-\omega)t}{2}}\cdot 2i\sin\frac{\omega_{fi}-\omega}{2}t$$

$$|a_{fi}|^2=\frac{|\mathcal{F}_{fi}|}{\hbar^2(\omega_{fi}-\omega)^2}\,4\sin^2\left(\frac{\omega_{fi}-\omega}{2}t\right)\qquad \alpha=\frac{\omega_{fi}-\omega}{2}$$

т.е. $|a_{fi}|^2=\frac{|\mathcal{F}_{fi}|^2}{\hbar^2}\frac{\sin^2\alpha t}{\alpha^2}$

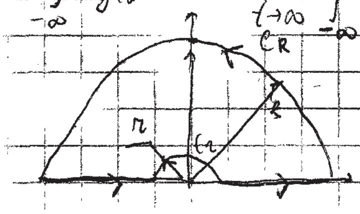
$$g(\alpha)=\lim_{t\to\infty}\frac{\sin^2\alpha t}{\alpha^2 t}$$

$\alpha\neq0\to g(\alpha)=0$

$\alpha=0\to\lim\limits_{\alpha\to0}g(\alpha)=\lim\limits_{\alpha\to0}\lim\limits_{t\to\infty}\left(\frac{\sin^2\alpha t}{\alpha t}\right)^2\cdot t=\lim\limits_{t\to\infty}t=\infty$

$g(\alpha)\sim\delta(\alpha)$?

$$\int_{-\infty}^{+\infty}g(\alpha)\,d\alpha=\lim_{t\to\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\sin^2\alpha t}{\alpha^2t^2}\,d\alpha t=\left\{x=\alpha t\right\}=i\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\sin^2x}{x^2}\,dx$$



$$\oint g(\xi)\,d\xi=0$$

$$\int_{-R}^{-r}g(\xi)\,d\xi+\int_{C_r}\tilde{g}(\xi)\,d\xi+\int_{+r}^{R}g(\xi)\,d\xi+\int_{C_R}\tilde{g}(\xi)\,d\xi=0$$

$$\lim_{R\to\infty}\int_{C_R}\tilde{g}(\xi)d\xi=0$$ – по лемме Жордана.

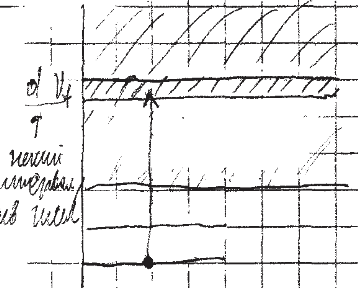
$$I=-\lim_{r\to 0}\int_{C_r}\tilde{g}(\xi)d\xi=\left\{\begin{aligned}\xi&=re^{i\varphi}\\ d\xi&=r d\varphi\end{aligned}\right\}=?$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\sin^2 x}{x^2}dx=\pi$$

$$g(\alpha)=\lim_{t\to\infty}\frac{\sin^2(\alpha t)}{\alpha^2 t}=\pi\delta(\alpha)\qquad |a_{fi}|^2=\frac{|F_{fi}|^2}{\hbar^2}t\,\frac{\sin^2(\alpha t)}{\alpha^2 t}=\frac{|F_{fi}|^2}{\hbar^2}t\,\pi\cdot\delta\left(\frac{\omega_{fi}-\omega}{2}\right)$$

$$\frac{\omega_{fi}-\omega}{2}=\frac{E_f^{(0)}-E_i^{(0)}-\hbar\omega}{2\hbar}\qquad \delta(\alpha x)=\frac{1}{|\alpha|}\delta(x)$$

$$|a_{fi}|^2=\frac{2\pi}{\hbar}|F_i|^2\delta(E_f-E_i^{(0)}-\hbar\omega)\,t$$



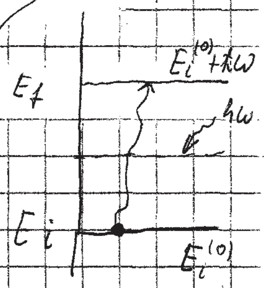
$d\nu=dE$ – для невырожд. сп-ма

~~a_{fi}~~

$$|a_{fi}|^2 d\nu_f=\frac{2\pi}{\hbar}|F_{fi}|^2\delta(E_f-E_i^{(0)}-\hbar\omega)\,t\cdot d\nu_f$$

$$\boxed{dW_{fi}=\frac{|a_{fi}|^2 d\nu_f}{t}=\frac{2\pi}{\hbar}|F_{fi}|^2\,\underbrace{\delta(E_f-E_i^{(0)}-\hbar\omega)}_{\text{з сох. эн-ии}}\,d\nu_f}$$

вероятн перехода в един. времени



Невырожденный случай: $n \to d\nu_f=dE$

$$\boxed{W_{E_i}=\int dW_{E_i}=\frac{2\pi}{\hbar}|F_{E_i}|^2}$$ – золотое правило Ферми

$F_{nm}=F^*_{mn}$ – если $\hat{F}$ - эрмитов

$V=Fe^{i\omega t}+Ge^{-i\omega t}$

$V=Fe^{i\omega t}+F^+e^{-i\omega t}$

$V=A\sin\omega t+B\cos\omega t$

Аналог: геом. оптика

Квазиклассическое приближение (квазиклассика)

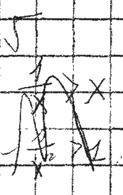
Приближение В К Б
Вентцель, Крамерс, Бриллюэн

Приближённый способ прибл. решения ур-ния Ш-ра

1D: $\psi_{xx} + K^2(x)\psi = 0$ $\qquad \lambda_{дб} \to 0,\ K = \frac{2\pi}{\lambda} \to \infty$

т.е. $K^2(x)$ - большое по сравнению с масштабом.

Если $K = const$, то $\psi \sim e^{\pm iKx}$ $\qquad \varphi(x) = Kx$



если $\left|\frac{dK}{dx}\right| \ll K^2 \longrightarrow \overset{*}{\psi} \sim e^{i\varphi(x)}$

$K(x)$ - гладкая ф-ция.

$\psi = A_{(x)} e^{i\varphi(x)} \leftarrow$ неточная замена – пока нет никаких приближений.

$\psi'_x = (A'_x + i\varphi'_x A)e^{i\varphi}$

$\psi''_{xx} = (A''_{xx} + i\underset{\sim}{\varphi_x} A_x + i\varphi''_{xx}A)e^{i\varphi} + i\varphi'_x e^{i\varphi}(A'_x + i\varphi'_x A)$

$$\begin{cases} Re: & A''_{xx} + K^2(x)A - \varphi'^2_x A = A''_{xx} + [K^2(x) - \varphi'^2_{(x)}]A = 0 \\ Im: & 2\varphi'_x A'_x + \varphi''_{xx} A = 0 \end{cases}$$

$\frac{\partial}{\partial x}(\varphi'_x A^2) = 0 \to \underline{\varphi'_x A^2_{(x)} = const}$

!! Предположим, что A''_{xx} - мал, тогда

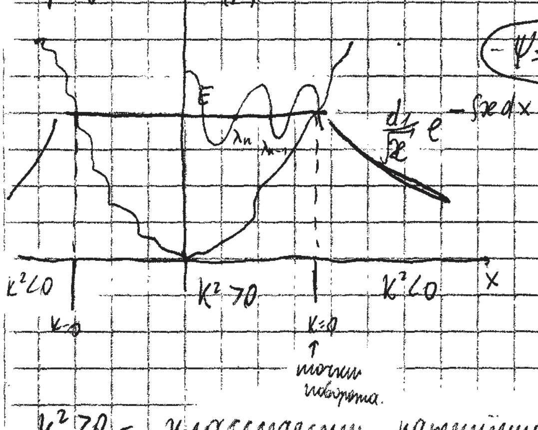
$\varphi'^2_x = K^2(x)$ – ур-ние Эйконала

$K^2 = \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(x)]$ $\qquad \varphi_{(x)} = \frac{S}{\hbar}$

$\frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x)) - \frac{p^2}{2m} = 0$ $\qquad K(x) = \frac{p}{\hbar}$

$\boxed{\frac{p^2_{(x)}}{2m} + U(x) = E}$ – ур-ние Якоби

Пусть



В классич. разрешённой об-ти

$\varphi = \pm \int K dx$ $\qquad KA^2 = const = C \to A = \frac{C}{\sqrt{K}}$

$\boxed{\psi = \frac{C_1}{\sqrt{K}} e^{i\int K dx} + \frac{C_2}{\sqrt{K}} e^{-i\int K dx}}$ – ВКБ-решение в классически разрешённой области

В классич. запрещ. области

$K^2 < 0$ $\qquad \varkappa^2 = -K^2 > 0$

$K^2 = \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(x)] = -\varkappa^2$

$\boxed{\psi = \frac{d_1}{\sqrt{\varkappa}} e^{\int \varkappa dx} + \frac{d_2}{\sqrt{\varkappa}} e^{-\int \varkappa dx}}$ – классич. запрещ. об-ть.

$K^2 > 0$ - классически разрешённой область.
$K^2 < 0$ - классически запрещённая

Условия применения: $A(x)$ - медленная ф-ция
$\varphi(x)$ - быстрая ф-ция.

Проверка правомерности сделанного приближения

$|A_{xx}| \ll K^2 A$, из sin $A \sim K^{-\frac12}$ т.е. $\left(K^{-\frac12}\right)''_{xx} \ll K^{\frac32}$

$$\left|-\frac12\left(K^{\frac32}K'_x\right)'_x\right| = \left|-\frac12\left(-\frac32 K^{-\frac52}K_x^2 + K^{-\frac32}K_{xx}\right)\right| \ll K^{\frac32} \quad \Big| K^{\frac52}$$

$$\left|\frac34 K_x'^2 - \frac12 K K''_{xx}\right| \ll K^4$$

~~Предположим, что $K K''_{xx} \ll K_x'^2$ тогда.~~

$K_x'^2 \ll K^4$

$K'_x \ll K^2$,

$K''_{xx} \ll 2K K_x$

для оценки этого члена используем $A = \frac{C}{\sqrt{K}}$

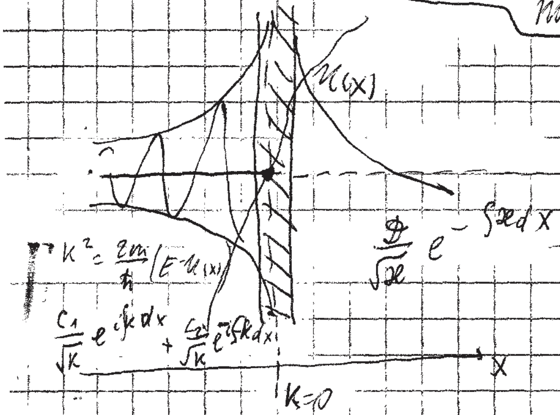
$\lambda = \frac{2\pi}{K}$, тогда условие $K'_x \ll K^2$ перепишется $\frac{\partial\lambda}{\partial x} \ll 2\pi$

$\frac{\partial\lambda}{\partial x} \sim \frac{\lambda_n - \lambda_{n-1}}{\lambda_n} \ll 1$ изменение λ на периоде мало по сравнению с периодом.

! Справедливо только для высоких уровней.

~~Поведение~~

Квазиклассическая волновая ф-ция вблизи точки поворота



$\Psi''_{xx} + K^2(x)\Psi = 0$ – ур-ние с действ. коэффиц.

~~в ро~~ в КРО: K^2 – положит. т.е.

$$\Psi = \frac{B_1}{\sqrt{K}}\sin\int K dx + \frac{B_2}{\sqrt{K}}\cos\int K dx = \frac{B}{\sqrt{K}}\cos\left[\int K dx + Z(x)\right]$$

в т-ке поворота приближение ВКБ не работает

Надо сшить 2 решения.

Вблизи т-ки поворота любой произв. потенциал может быть разложен в ряд и если 2-я точка поворота далеко от 1-й

$-K^2(x) = \chi_0^2(x-a)$, где χ^2 = const.

$$\Psi''_{xx} - \chi^2(x-a)\Psi = 0$$

↑ Ур-ние Эйри

Решение этого ур-ния: ↗ $Ai(x\to\infty)\to 0$

Bi

Расходимость ВКБ решения вызвана незаконностью сделанных предположений

в КЗО:

$$\frac{D}{\sqrt{\varkappa}}e^{-\int\varkappa dx} = \frac{D}{\sqrt{\chi}(x-a)^{\frac14}}e^{-\chi\int_a^x (x-a)^{\frac12}dx} = \frac{D}{\sqrt{\chi}}(x-a)^{-\frac14}\exp\left\{-\frac{2\chi}{3}(x-a)^{\frac32}\right\} \text{ б } x=a.$$

$\varkappa_T^2 = \chi^2(x-a$

в КРО: $\varkappa = \chi(x-a)^{\frac12}$

$k = \chi(a-x)^{\frac12}$

$$\frac{C_1}{\sqrt{\chi}}(a-x)^{-\frac14}e^{\frac23 i(a-x)^{\frac32}} + \frac{C_2}{\sqrt{\chi}}(a-x)^{-\frac14}e^{-\frac23 i(a-x)^{\frac32}}$$

$\psi''_{xx} + K^2(x)\psi = 0$ $\qquad K^2 = \frac{2m}{\hbar^2}[E-U(x)]$

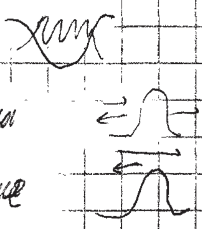
$\sim \frac{1}{\sqrt{K}} e^{i\int K dx}$

В классике нет понятия волновой ф-ции

Задача 1: Движение в яме

Задача 2: Отражение от барьера

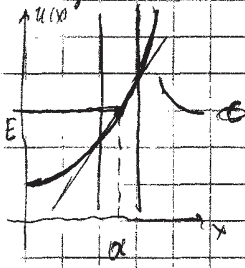
Задача 3: Надбарьерное отражение



Движение в яме.

Рассмотрим задачу о сшивке решения на границе.

Г.У. в т-ке поворота:



$K^2(x) = -\varkappa^2(x-a)$

$\underline{К3О}$ $\quad \frac{C}{\sqrt{\varkappa}(x-a)^{\frac14}} e^{-\frac{2\varkappa}{3}(x-a)^{\frac32}}$ $\qquad x >> a$

Условие квазиклассики: $|K_x| << K^2 \leftarrow A''_{xx} + A(K^2 - \varphi_x^2) = 0$

$|A''_{xx}| << A K^2$

$\frac{1}{2}\varkappa (x-a)^{-\frac12} << \varkappa^2 (x-a)$

$1 << \varkappa (x-a)^{\frac32}$ - вблизи точки поворота это нарушается.

$\underline{КРО}$: $\quad \frac{C_1}{\sqrt{\varkappa}(a-x)^{\frac14}} e^{i\frac23\varkappa(a-x)^{\frac32}} + \frac{C_2}{\sqrt{\varkappa}(a-x)^{\frac14}} e^{-i\frac23\varkappa(a-x)^{\frac32}}$

Вблизи т-ки поворота

$\psi''_{xx} - \varkappa^2(x-a)\psi = 0$ — Ур-ние Эйри

не решая этого ур-ние можно получить Г.У.

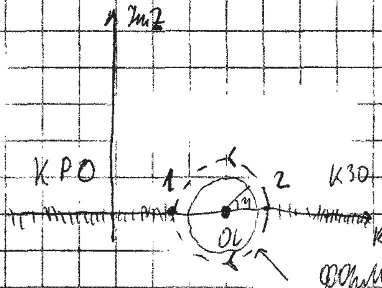
Рассмотрим формально x как компл. переменную.

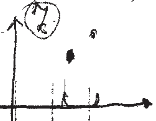
$x \to z$

$\mathbb{C}$: $z = x + iy$

$\frac{\partial f}{\partial z} = \lim_{\Delta z \to 0} \frac{f(z+\Delta z) - f(z)}{\Delta z}$ ← если эта произв. не зав. от формы пути, то ф-ция f - аналитическая

Можно выч-ть вдоль оси X.





формально применимо приб. ВКБ

Метод Цвана: Далеко от точки поворота в компл. пл-ти

Zwaan

$z-a=\rho e^{i\varphi}$

$(z-a)^{\frac{1}{4}}=\rho^{\frac{1}{4}}e^{i\frac{\varphi}{4}+i\frac{\pi}{2}n}$

$\frac{2}{3}(z-a)^{3/2}=\frac{2}{3}\rho^{3/2}e^{i\frac{3\varphi}{2}}$

Выбор ветви $n=0$ (Чтобы при $\varphi=0$ ~~$z-a$~~ $(z-a)^{\frac{1}{4}}$ - было чисто положит.

Пойдём по верхней полуокружности! (Нижний путь: $-\pi<\varphi<0$)

т.е $0<\varphi<\pi$

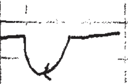
$2\to1$: $(x-a)^{\frac{1}{4}}\to(a-x)^{\frac{1}{4}}e^{i\frac{\pi}{4}}$

$$\frac{C}{\sqrt{\varkappa}\,(z-a)^{\frac{1}{4}}}e^{-\frac{2\varkappa}{3}(z-a)^{3/2}}\to\frac{C}{\sqrt{\varkappa}}\frac{e^{-i\frac{\pi}{4}}}{(a-x)^{\frac{1}{4}}}e^{i\frac{2\varkappa}{3}(a-x)^{\frac{3}{2}}}$$

т.е $C_1=Ce^{-i\frac{\pi}{4}}$

Волна всегда бежит в направлении возрастания фазы

по нижней полуокружности:



аналогично $C_2=Ce^{i\frac{\pi}{4}}$ $\frac{C}{\sqrt{\varkappa}(z-a)^{\frac{1}{4}}}e^{-\frac{2\varkappa}{3}(z-a)^{3/2}}\to\frac{Ce^{i\frac{\pi}{4}}e^{-i\frac{2\varkappa}{3}(a-x)^{\frac{3}{2}}}}{\sqrt{\varkappa}(a-x)^{\frac{1}{4}}}$

т.е $\frac{1}{\sqrt{\varkappa}}e^{\int_a^x\varkappa dx}\to2\frac{1}{\sqrt{k}}\cos\left(\int_a^x kdx-\frac{\pi}{4}\right)$ - гран. условия.

в ВКБ приближении теряется $\frac{1}{4}$ длины волны при отражении.

~~$-(z-a)^{3/2}=\rho^{3/2}(e^{i\frac{3\varphi}{2}})$~~
~~$-\sin\frac{3\varphi}{2}-\cos\frac{3\varphi}{2}$~~

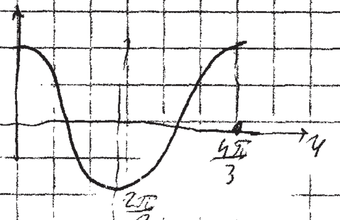
$-(z-a)^{3/2}=\rho^{3/2}\left(-e^{i\frac{3\varphi}{2}}\right)$

$-i\sin\frac{3\varphi}{2}-\cos\frac{3\varphi}{2}$

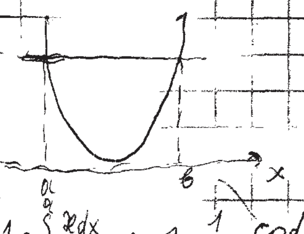
$$e^{-\frac{2}{3}\varkappa(z-a)^{3/2}}\to e^{\frac{2}{3}i\varkappa(a-z)^{3/2}-\frac{\pi}{4}}+e^{-i\frac{2}{3}\varkappa(a-z)^{3/2}}$$

Если $\varphi=\pi-\delta$, то $e^{3i\frac{\varphi}{2}}=i\sin\frac{3\varphi}{2}+\cos\frac{3\varphi}{2}$

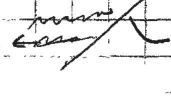
при обходе по 1-му пути одна exp очень мала по сравнению с большой exp.

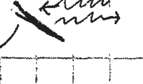


Задача об ур-нях в яме



$$\frac{1}{\sqrt{\varkappa}}e^{-\left|\int_a^x\varkappa dx\right|}\to2\frac{1}{\sqrt{k}}\cos\left(\left|\int_a^x kdx\right|-\frac{\pi}{4}\right)$$





$\frac{1}{\sqrt{\varkappa}}e^{\int_x^a\varkappa dx}\to2\frac{1}{\sqrt{k}}\cos\left\{\int_a^x kdx-\frac{\pi}{4}\right\}$

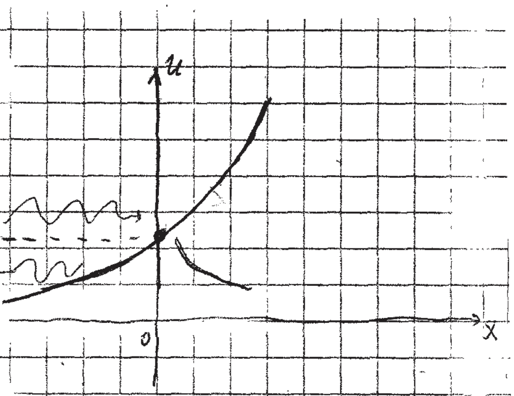
Результат $\int_a^b kdx=\pi(2n+1)$

$\frac{2}{\sqrt{k}}\cos\left\{\int_x^b kdx-\frac{\pi}{4}\right\}\to\frac{1}{\sqrt{\varkappa}}e^{-\int_b^x\varkappa dx}$

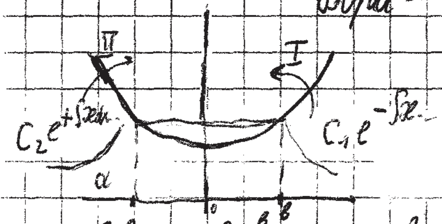
ВКБ

$$\frac{2C}{\sqrt{k}}\cos\left(\left|\int_0^x k\,dx\right|-\frac{\pi}{4}\right) \leftarrow \frac{C}{\sqrt{\varkappa}}e^{-\left|\int_0^x \varkappa\,dx\right|}$$

Правило сшивки может применяться только в 1-м направлении



Задача: Правило квантования Бора - Зоммерфельда.



I) $\frac{2C_1}{\sqrt{k}}\cos\left\{\int_x^{в} k\,dx-\frac{\pi}{4}\right\}$

I и II должны давать одно и тоже, т.е

II) $\frac{2C_2}{\sqrt{k}}\cos\left\{\int_a^x k\,dX-\frac{\pi}{4}\right\}$

$$\mathrm{I}\equiv\mathrm{II}$$

$$C_1\cos\varphi_1=C_2\cos\varphi_2 \quad \rightarrow\left|\frac{C_1}{C_2}\right|=1$$

т.е $\cos\varphi_1=\pm\cos\varphi_2$

$$\cos\varphi_1=\cos(\varphi_2+\pi n)$$

$$\cos\varphi_1-\cos(\varphi_2+n\pi)=0 \qquad \cos x-\cos y=-2\sin\frac{x-y}{2}\sin$$

a) $\frac{\varphi_1+\varphi_2+\pi n}{2}=\frac{1}{2}\left\{\int_a^x k\,dx+\int_x^{в} k\,dX-\frac{\pi}{2}+\pi n\right\}=\pi m$

$$\int_a^{в} k(x)\,dx=\frac{\pi}{2}+\pi(2m-n)=\frac{\pi}{2}+\pi l$$

$\int_a^{в} k(x)\,dx=\frac{\pi}{2}+\pi l$ — правило квантов. Бора - Зоммерфельда

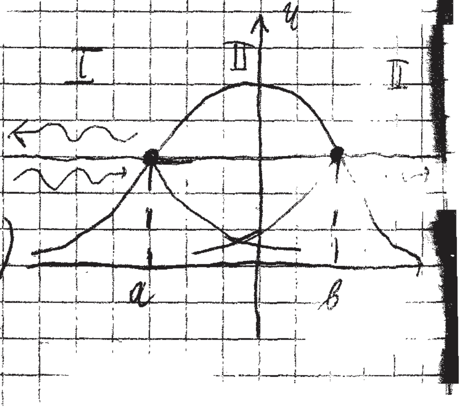
$l=0,\pm1.$

$$2\int_a^{в} k(x)\,dx=\pi(2l+1) \quad l=0,\pm1,\pm2,$$

1912

$$2\int_a^{в} k(x)\,dx=\oint k\,dX \equiv \oint p\,dx=2\pi\hbar\left(l+\frac{1}{2}\right)$$

Задача „Прохождение через барьер"



Можем ли мы воспользоваться

Слева

$$\frac{1}{\sqrt{k}}e^{i\int_a^x k\,dx}+\frac{R}{\sqrt{k}}e^{-i\int_a^x k\,dx}$$

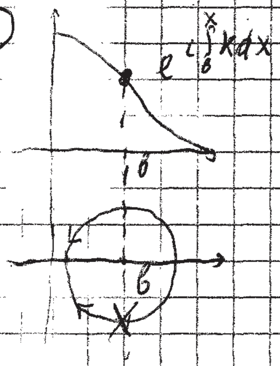
$$-\varkappa^2=k^2=\frac{2m}{\hbar}(E-U(x))$$

$$\frac{C_1}{\sqrt{\varkappa}}e^{-\int_a \varkappa dx}+\frac{C_2}{\sqrt{\varkappa}}e^{\int_a^x \varkappa dx}$$

$$\frac{I}{\sqrt{k}} e^{+i\int_b^x k dx}$$

Вывод новых Г.У.:

①



$$K^2 = \chi^2 (x-b)$$

$$K = \chi (x-b)^{\frac{1}{2}}$$

$$\int_b^x K dx = \frac{2}{3} \chi (x-b)^{\frac{3}{2}}$$

$$\frac{C}{\chi^{\frac{1}{2}} (x-b)^{\frac{1}{4}}} e^{i\chi\frac{2}{3}(x-b)^{3/2} + i\frac{\pi}{4}}$$

переходит при обходе п-ка поворота в

$$x - b = \rho e^{i\varphi}$$

$$(x-b)^{3/2} = \rho^{3/2} e^{i\frac{3}{2}\varphi}$$

$$(x-b)^{\frac{1}{4}} = \rho^{\frac{1}{4}} e^{i\frac{\varphi}{4}}$$

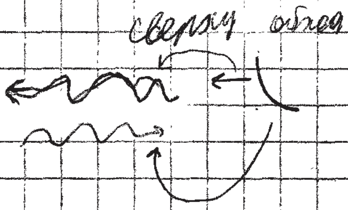
по верхнему контуру

$$\frac{C}{\chi^{\frac{1}{2}} (b-x)^{\frac{1}{4}}} e^{\cancel{+i\chi\frac{2}{3}(x-b)^{3/2} + i\frac{\pi}{4}}}$$

$$\frac{C}{\chi^{\frac{1}{2}} (x-b)^{\frac{1}{4}}} e^{i\chi\cdot\frac{2}{3}(x-b)^{3/2} + i\frac{\pi}{4}} \longrightarrow \frac{C e^{\chi\frac{2}{3}(b-x)^{3/2}}}{\chi^{\frac{1}{2}} (b-x)^{\frac{1}{4}}}$$

$e^{i\frac{3}{2}\pi} = -e^{i\frac{\pi}{2}} = -i$ т.к.

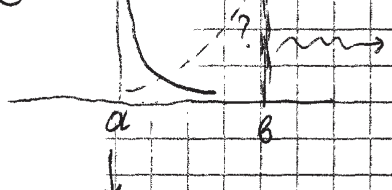
$(x-b)^{3/2} \to -i(b-x)^{3/2}$



т.е. правило ~~нового~~ пересчета:

$$\frac{C}{\sqrt{\varkappa}} e^{\int_x^b \varkappa dx} \longleftarrow \frac{C}{\sqrt{K}} e^{i\int_b^x K dx + i\frac{\pi}{4}}$$

②

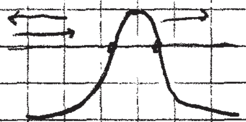


по границе a:

$$\frac{2C}{\sqrt{k}} \cos\left(\int k dx - \frac{\pi}{4}\right) \longleftarrow \frac{C}{\sqrt{\varkappa}} e^{-|\int \varkappa dx|}$$

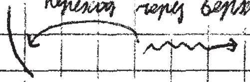
$$\begin{cases} \frac{2C}{\sqrt{k}} \cos\left(\int_x^a k dx - \frac{\pi}{4}\right) & x < a \\ \frac{C}{\sqrt{\varkappa}} e^{-\int_a^x \varkappa dx} = \frac{C_1}{\sqrt{\varkappa}} e^{-\int_x^b \varkappa dx}, & b > x > a \\ \frac{C}{\sqrt{k}} e^{i\int_b^x k dx} & x > b \end{cases}$$

Ответ: $T = e^{-\int_a^b k dx}$



$$\frac{C'}{\sqrt{æ}}e^{\int_x^b æ dx} \xleftarrow{\frown} \frac{C'}{\sqrt{K}}e^{i\int_b^x K dx + i\frac{\pi}{4}}$$

переход через верхнюю полуплоскость



Сшиву- будет exp малый вклад

$$\frac{2C^*}{\sqrt{K}}\cos\left(\int_a^x K dx - \frac{\pi}{4}\right) \longleftarrow \frac{C}{\sqrt{æ}}e^{-\int_a^x æ dx}$$

$$\begin{cases} \frac{2C}{\sqrt{K}}\cos\left(\int_a^x K dx - \frac{\pi}{4}\right) & x<a \\ \frac{C}{\sqrt{æ}}e^{-\int_a^x æ dx - \int_x^b + \int_x^b} = \frac{C}{\sqrt{æ}}\exp\left\{-\int_a^b æ dx + \int_x^b æ dx\right\} \longrightarrow C' = C\cdot\exp\left\{-\int_a^b æ dx\right\} \\ C\cdot e^{-\int_a^b æ dx}\cdot\frac{1}{\sqrt{K}}e^{i\int_b^x K dx + i\frac{\pi}{4}} \quad - \text{прошло} \end{cases}$$

т.к. $\cos\varphi = \frac{1}{2}e^{i\varphi} + \frac{1}{2}e^{-i\varphi}$

то $\boxed{T = e^{-\int_a^b æ dx}}$

$\Psi''_{xx} + K^2(x)\Psi = 0$

ПОТОК: $\int$ такого вида $\vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m}(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\cdot\nabla\Psi^*)$

$$\Psi^*\Psi'_x - \Psi\cdot\Psi'^*_x = const.$$

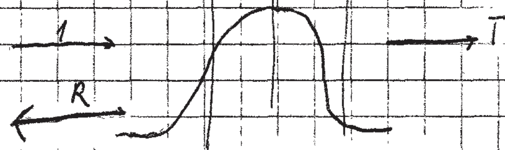
Сохранение величины ρ:

з-н сохранен. $\rightarrow \frac{\partial\rho}{\partial t} + \operatorname{div}\vec{\Pi} = 0$ $\quad \vec{\Pi}$ - поток величины $\vec{\rho}$

$$\left.\begin{aligned} i\hbar\dot{\Psi} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi_{xx} \\ -i\hbar\dot{\Psi}^* &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi^*_{xx} \end{aligned}\right|\begin{aligned} &\cdot\Psi^* \\ &\cdot\Psi \end{aligned} -$$

→ получаем

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}(\Psi^*\Psi''_{xx} - \Psi\cdot\Psi^*_{xx}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x}(\Psi^*\Psi_x - \Psi\cdot\Psi^*_x)$$



в каждом сечении число частиц сохраняется

$1 - |R|^2 = |T|^2$ - ЗСП

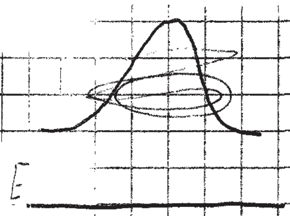
1 [illegible] $R = \underline{1}$ $\quad T = e^{-\int_a^b æ dx}$

$|T|^2 = e^{-2\int_a^b æ dx}$ если по нему найти $|R|$, то

$$\boxed{\begin{cases}|R| = \sqrt{1-\ldots} = 1 - \frac{1}{2} e^{-2\int_a^b \varkappa dx} \\ T = e^{-\int_a^b \varkappa dx}\end{cases}}$$

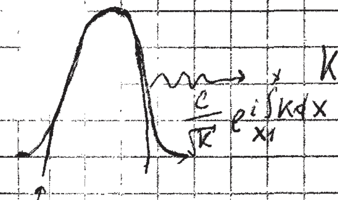
ВКБ с поправкой.

Задача: „Надбарьерное отражение".



Т-ка поворота — т-ки, где $K(x)=0$

$$\psi''_{xx} + K^2(x)\,\psi = 0$$

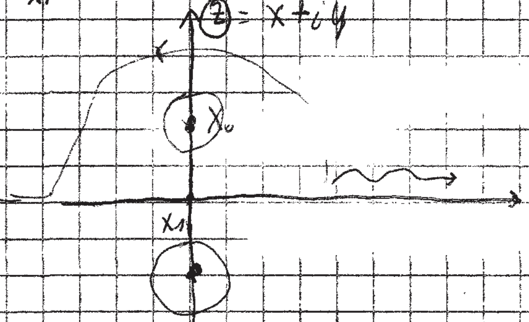


$$\frac{c}{\sqrt{k}} e^{i\int_{x_1}^{x} k dx}$$

аппроксимируем параболой

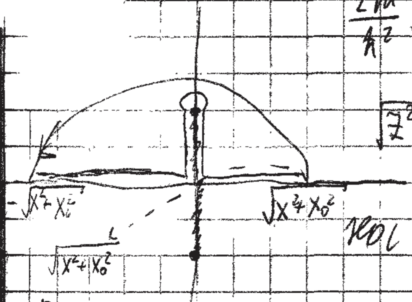
$$K^2(x) = \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x)) = \frac{2m}{\hbar^2}(E + \alpha x^2) \qquad x^* = \pm i\sqrt{\frac{E}{\alpha}} = \pm i \cdot x_0$$

$U(x) = -\alpha x^2$



$$K(z) = \sqrt{E + \alpha z^2} \cdot \frac{2m}{\hbar^2} \,\,\| \qquad z = \rho e^{i\varphi} + i x_0 \qquad \begin{matrix}\rho \to \infty \\ \varphi = 0 - \varepsilon\end{matrix}$$

$$\frac{2m}{\hbar^2}\sqrt{\alpha}\sqrt{(z + iX)(z - iX_0)} \qquad \begin{matrix}\rho \to -\infty \\ \varphi = \pi + \varepsilon\end{matrix}$$



$$\sqrt{z^2 + x_0^2} \,\,\| \,\, \sqrt{(2iX_0 + \rho e^{i\varphi})\rho e^{i\varphi}} \sim \rho e^{i\varphi}$$

[illegible]

$$\rho^2 e^{i(\varphi + 2\pi n)} = \\ = \rho$$

При переходе через разрез мы получили [illegible] множ

$$\underbrace{\frac{Ce^{i\pi}}{\sqrt{k}} e^{-i\int_{x_1}^{x} kdx}}_{\psi_-(x)} \longleftarrow \underbrace{\frac{c}{\sqrt{k}} e^{i\int_{x_1}^{x} kdx}}_{\psi_+(x)}$$

волна, убегающая направо

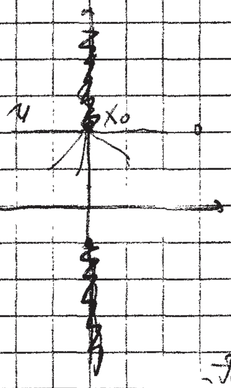
Прошедшая волна ≈ равна падающей

$$\left|\frac{\psi_-}{\psi_+}\right|^2 = |R|^2 = \qquad \psi_- = \frac{ce^{i\pi}}{\sqrt{k}} e^{-i\int kdx} \qquad \boxed{|R|^2 = e^{-4\operatorname{Im}\int_{x_1}^{x_0} kdX}}$$

$$= \left|e^{i\int_c kdx}\right|^2 = \left|e^{2i\int_{x_1}^{x_0} kdx}\right| = e^{-4\operatorname{Im}\int_{x_1}^{x_0} kdX}$$

Для подбарьерн. слоя

$$|R|^2 = e^{-4\int_0^{x_0}\sqrt{x_0^2-x^2}\,dx}. \qquad x_0 = \sqrt{\frac{E}{\alpha}}$$



$$\sqrt{z^2+x_0^2} = \sqrt{(z+ix_0)(z-ix_0)} =$$

$$= \sqrt{(2ix_0+\rho e^{i\varphi})\rho e^{i\varphi}} =$$

$\rho < |x_0|$

~~$-\pi < \varphi < 0$~~

$-\pi < \arg z_2 < 0$

$0 < \arg z_1 < \pi$

На пути следования exp спадающее решение не должно быть б.м. на фоне exp. нарастающего.

Ряд называется асимптотическим, если

$$\left|f(x) - \sum_0^N a_n x^n\right| < a_{n+1} x^{n+1}$$

$$\frac{C}{\sqrt{\varkappa}} e^{-\int\varkappa dx} + \frac{C}{\sqrt{\varkappa}} e^{\int\varkappa dx} + O\left(\frac{k_x}{z^2}\right)$$

главные члены асимптотического разложения

Спин

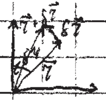
to spin - кружить, вращать

- внутренняя степень свободы.

Орбитальный момент $\vec{L} = -i\hbar[\vec{r}\,\nabla] = [\vec{r}.\vec{p}]$ - оператор б.м. вращения.

оператор вращения $\hat{R} = 1 + \delta\vec{\varphi} \cdot \frac{i}{\hbar}\vec{L}$

$$\Psi(\vec{r} + \delta\vec{r}) = \hat{R}\,\Psi(\vec{r})$$



$$\delta\vec{r} = [\delta\vec{\varphi} \times \vec{r}]$$

у частицы может быть несколько волновых ф-ций.

$$\begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \vdots \end{pmatrix} = \Psi_{\sigma} \quad \sigma = 1, 2, 3.$$

внутренние степени свободы частицы

предположим, что эта степень свободы связана с вращением.

КЛМ геом. оп.

КВМ волн. оп.

Пример из электродинамики → поляризация. (Аналог)

Вектор - совокупность 3-х чисел, которые при повороте системы координат преобразуются один. обр. как r

было: при повороте

$$E_x\, E_y,\, E_z \longrightarrow R_{xx}E_x + R_{xy}E_y + R_{xz}E_z, \dots$$

т.е

$$\begin{pmatrix} E_x' \\ E_y' \\ E_z' \end{pmatrix} = \overleftrightarrow{R} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix}$$

говорят, что $E_x\, E_y,\, E_z$ реализуют неприводимое представление группы вращений.

$\hat{R} = 1 + \delta\vec{\varphi} \cdot \frac{i}{\hbar}\vec{S}$, $\vec{S}$ - оператор спина, действуя на Ψ_{σ} „перепутывает" компоненты

$$\begin{pmatrix} \Psi_1' \\ \Psi_2' \end{pmatrix} = \hat{R} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}$$

Если говорить, что $\vec{S}$ - оператор. б.м. поворота с-мы

! Все моменты измеряют в единицах $\hbar$.

$$\vec{l} = -i[\vec{r}, \vec{\nabla}] = \frac{L}{\hbar}$$

Коммут. соотн.

$$\{l_y, l_z\} = i\,l_x, \quad \{l_z, l_x\} = i\,l_y, \quad \{l_x\, l_y\} = i\,l_z$$

Для $\vec{S}$, нет представления как у $\vec{l}$, но оператор поворота сам по себе не зависит ни от каких ф-ций.

$S_x \rightarrow$ вращает с-му коорд. относит. оси x. и т.д.

т.е $\{S_y, S_z\} = i\,S_x$, $\{S_z, S_x\} = i\,S_y$ $\{S_x\, S_y\} = i\,S_z$

$S_yS_z - S_zS_y \rightarrow$ поворот относит. y затем z, после в обратную сторону отн. z, а затем y.

$\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{pmatrix}$ → Если Ψ_σ - n-компонентная,
то $\vec{\hat S}$ - матрица $n \times n$.

$\hat S_x, \hat S_y, \hat S_z$ - не коммутируют, и т.е. нет ~~собств~~ общей с-мы собств ф-ций,

$\hat S_z \Psi_{\sigma_z} = \sigma_z \Psi_{\sigma_z}$ - в качестве базисных ф-ций выберем собств. ф-ции оператора $\hat S_z$

$\hat S_z$ - действует на переменную σ_z $\quad l_z \Psi_m(\varphi) = m \Psi_m(\varphi)$
она может принимать значения 1, 2, .

$$\hat S_z |\sigma_z\rangle = \sigma_z |\sigma_z\rangle$$

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

$\vec{\hat S}^2$ - коммутирует с любой проекцией, т.е. $\{\vec{\hat S}^2, \hat S_i\} = 0$ где $i = x, y, z$

вводится $\hat S_\pm = \hat S_x \pm i \hat S_y$

$\{\hat S_+ \hat S_-\} = 2 \hat S_z$ $\quad$ выражаем $\vec{\hat S}^2 = \hat S_+ \hat S_- + \hat S_z^2 - \hat S_z = \hat S_- \hat S_+ + \hat S_z^2 + \hat S_z$

$\{\hat S_z, \hat S_\pm\} = \pm \hat S_\pm$ $\quad$ в своем собств. предст. диагонален

$$\hat\sigma_z = \begin{pmatrix}\sigma_{z1} & \dots & \\ \dots & \sigma_{z2} & \\ \dots & & \end{pmatrix}$$

$$\hat S_z(\hat S_\pm |\sigma_z\rangle) = (\hat S_\pm \hat S_z \pm \hat S_\pm)|\sigma_z\rangle =$$
$$= \hat S_\pm (\sigma_z \pm 1)|\sigma_z\rangle$$

т.е. $\hat S_\pm |\sigma_z\rangle \sim |\sigma_z \pm 1\rangle$ - собственная ф-ция $\hat S_z$ т.к.

$$\hat S_z (\hat S_\pm |\sigma_z\rangle) = (\sigma_z \pm 1)(\hat S_\pm |\sigma_z\rangle)$$

$\vec{\hat S}^2 - \bar{\hat S}_z^2 = \bar{\hat S}_x^2 + \bar{\hat S}_y^2 \geq 0$ $\quad \exists$

Обозначим число $s = \max \sigma_z$, тогда

$$\hat S_+ |s\rangle \cancel{\sim} |s+1\rangle = 0$$
$$\hat S_-^{(n)} |s\rangle \sim |s-n\rangle$$

$s - n = -s$ - min возможное значение $\hat\sigma_z$

получаем $2s+1$ - целое значение.

т.е. $2s+1$ - целое.

спин частицы → $s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2},$

$2s+1$ компонент $\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\\ \vdots\\ \Psi_n\end{pmatrix}$ $\quad$ Скалярные компоненты $s=0$ Ψ

$$s = \frac{1}{2} \to \begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\Psi_{\frac12}\\ \Psi_{-\frac12}\end{pmatrix} = \Psi_{\frac12}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + \Psi_{-\frac12}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

$$s = 1 \to \begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\\ \Psi_3\end{pmatrix}$$

$$\hat{S}^2|S\rangle = \underset{\overset{\shortparallel}{0}}{S_-S_+}|S\rangle + \underset{\overset{\shortparallel}{S^2}}{S_z^2}|S\rangle + \underset{\overset{\shortparallel}{S}}{S_z|S\rangle} = S(S+1)$$

$$\vec{S}^2 = S(S+1)$$

$\hat{S}_+$ – матричные элементы?

$\langle n|\hat{S}_+|m\rangle \sim \langle n|m+1\rangle$ Для спина в $\frac{1}{2}$:

$n \Rightarrow m+1 = n$

$m + 1 = n$

проверить матрицу:

$$S_- \sim \begin{array}{c|cc} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \hline \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 \end{array} \qquad S_- = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_+ \sim \begin{array}{c|cc} & & \\ \hline \frac{1}{2} & 0 & 1 \\ -\frac{1}{2} & 0 & 0 \end{array} \qquad S_+ = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}^2|S,\sigma_z\rangle = S(S+1)|S,\sigma_z\rangle$$

$$\hat{S}_z|S,\sigma_z\rangle = \sigma_z|S,\sigma_z\rangle$$

$$\hat{S}^2|\sigma_z\rangle = (S_+S_- + S_z^2 - S_z)|\sigma_z\rangle = S(\cancel{S+1}) \qquad S_+ = S_-^*$$

$$S(S+1)\langle\sigma_z|\sigma_z\rangle = \langle\sigma_z|\underset{\shortparallel}{S_+S_-}|\sigma_z\rangle + \sigma_z^2 - \sigma_z$$

$$\langle\sigma_z|S_+|\sigma_z-1\rangle\langle\sigma_z-1|S_-|\sigma_z\rangle = |\langle\sigma_z|\hat{S}_+|\sigma_z-1\rangle|^2 =$$

$$= S(S+1) - \sigma_z^2 + \sigma_z$$

т.е.

$$\langle\sigma_z|S_+|\sigma_z-1\rangle = \sqrt{(S+\sigma_z)(S-\sigma_z+1)}$$

$$\hat{S}_x = \frac{S_+ + S_-}{2}, \qquad \hat{S}_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_y = \frac{S_+ - S_-}{2i} = \frac{1}{2i}\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$$

Матрица Паули

$$\frac{1}{2}\vec{\sigma} = \vec{S}$$

Лекция

$$\langle \sigma_z | S_+ | \sigma_z - 1 \rangle = \sqrt{(S+\sigma_z)(S-\sigma_z+1)}$$

$$S_- = S_+^+$$

$$\langle \sigma_z | S_z | \sigma_z \rangle = \sigma_z$$

$$S_x = \frac{S_x + S_-}{2}, \quad S_y = \frac{S_+ - S_-}{2i}$$

Для спина: $\frac{1}{2} = S$

волновая ф-ция 2-х компонентна $\begin{pmatrix} \psi_{\frac{1}{2}} \\ \psi_{-\frac{1}{2}} \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} \psi_\uparrow \\ \psi_\downarrow \end{pmatrix}$

$$S_z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad S_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad S_y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad S_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

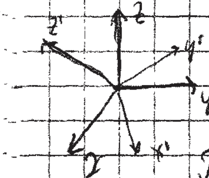
$$\psi_\uparrow = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \psi_\downarrow = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Практически все эл-ные частицы имеют спин либо 0, либо $\frac{1}{2}$.

Полный момент

$$\vec{J} = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{орбит}}}{\vec{L}} + \underset{\substack{\nwarrow \\ \text{спиновый}}}{\vec{S}}$$

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{x}) \\ \psi_2(\vec{x}) \end{pmatrix}$$



Оператор б. м. вращения:

$$\hat{R} = 1 + i\,\delta\vec{\varphi}\cdot\vec{J} = 1 + \frac{i}{\hbar}\,\delta\vec{\varphi}\cdot(\hbar\vec{J})$$

При преобразовании вращения:

$$\hat{R}\psi = \begin{pmatrix} \psi_1'(\vec{x}) \\ \psi_2'(\vec{x}) \end{pmatrix} = \psi_\sigma(x)$$

перемешивает компоненты волновой функции

$\vec{S} \to$ на σ - спиновая перем

$\vec{L} \to$ на $\vec{x}$ - коорд. перем.

$\{\hat{L}, \hat{S}\} = 0$ - действуют на разные переменные, т.е.

Спин $\to$ не имеет класс. аналога

Переход к классике $\psi = A e^{\frac{i}{\hbar} S}$

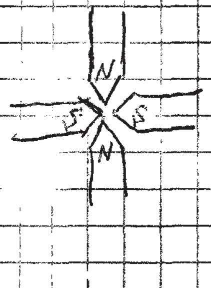
пренебречь A'', можно если $\hbar \to 0$

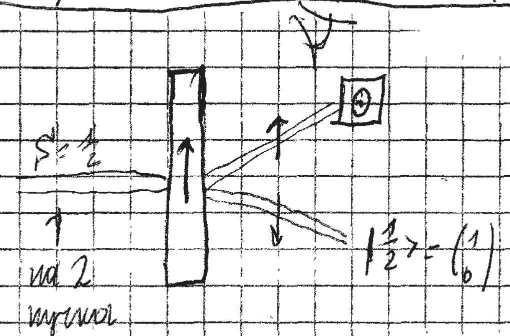
$$\langle m | l_z | m \rangle = m$$

$$L_z = \hbar l_z \to \overset{\text{класс. момент}}{M} = \underset{\substack{\downarrow \\ 0}}{\hbar} \cdot \underset{\searrow \infty}{m}$$

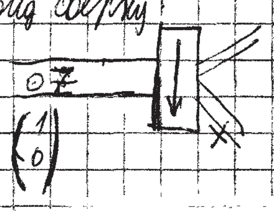
$S = \frac{\hbar}{2}$ $\hbar \to 0$ $S \to 0$

Эксперимент Штерна - Герлаха





вид сверху



разложили пучок по собств. ф-циям уст-ва

$$\begin{Bmatrix}1\\0\end{Bmatrix} = \frac{1}{2}\left\{\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}\right\}$$

Интенсивность расщепившихся пучков зависит от относит. угла поворота.

$$\vec S = \frac{1}{2}\vec\sigma$$

↑ матрица Паули.

$$\hat{\vec R} = 1 + \frac{i}{2}\vec{\vec\sigma}\cdot\delta\vec\varphi$$

$$f(x+a) = f(x) + a f'(a) + \ldots = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{f^{(n)}}{n!}a^n = \boxed{\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\partial_x^n}{n!}a^n} f = e^{a\frac{\partial}{\partial x}} f = e^{i\hat k\vec a} f = \underbrace{e^{i\frac{\hat p}{\hbar}a}} f$$

↑ оператор конечной трансляции

§55:

$$f(\vec r + [\delta\vec\varphi\times\vec r]) = e^{i\vec e\,\delta\vec\varphi} f(\vec r)$$ - оператор конечного вращения.

Можно ли записать $\hat R = 1 + \frac{i}{2}\vec\sigma\cdot\delta\vec\varphi$

$$\boxed{\hat{\vec R} = e^{\frac{i}{2}\vec\sigma\,\delta\vec\varphi}}$$

↑ это прав.

$$\begin{pmatrix}\psi_1\\\psi_2\end{pmatrix} \to \begin{pmatrix}\psi_1'\\\psi_2'\end{pmatrix}$$

при повороте на б. м. угол, тогда

ψ_1' — мало

$\delta\vec\varphi = \vec z_0\,\delta\varphi$, тогда

$$\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} = \frac{i}{2}\sigma_z\psi$$

т. к. σ_z - диагональная, то

$$\left.\begin{aligned}\frac{\partial\psi_1}{\partial\varphi} &= \frac{i}{2}\psi_1\\ \frac{\partial\psi_2}{\partial\varphi} &= \frac{i}{2}\psi_2\end{aligned}\right\}\ \psi = \psi_{\varphi=0}\,e^{\frac{i}{2}\sigma_z\varphi}$$

1) $\delta\vec\varphi = \vec z_0\,\delta\varphi$

2) $\psi_\varphi' = \frac{i}{2}\sigma_z\psi$

$$\begin{cases}\psi_\varphi' = \frac{i}{2}\sigma_z\psi\\ \psi_\varphi' = \frac{i}{2}\sigma_x\psi\end{cases}$$

$$e^{i\lambda\cancel{\varphi}}$$

$$\begin{pmatrix}-\lambda & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & -\lambda\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1\\\psi_2\end{pmatrix} = 0$$

$\lambda = +\frac{1}{2}$

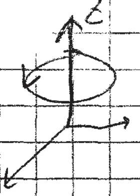
$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = 0 \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$\lambda = -\frac{1}{2}$

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = 0 \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$\Psi = C_1\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot e^{\frac{i}{2}\varphi} + C_2\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} e^{-\frac{i}{2}\varphi}$$

3) $\delta\varphi = \vec{y}_0\, \delta\varphi$



$\varphi = 2\pi$

$\Psi \rightarrow -\Psi$

Алгебра матриц Паули.

$$\vec{S} = \int \sum_{\sigma} \psi^*_{\sigma} \vec{S}_{\sigma\sigma'}\, \psi_{\sigma'}\, dV$$

$$S_z \overset{(V)}{=} \frac{1}{2}\, (\psi_1^* \; \psi_2^*)\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

Спин - внутренняя степень свободы. → волновая ф-ция - многокомпонентна

$\hat{R} = \hat{1} + i\delta\vec{\varphi}\cdot\vec{S} \rightarrow \psi_{\sigma} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$

$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

$\vec{S} = \frac{1}{2}\vec{\sigma}$

$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$

$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

$\hat{R} = \hat{1} + \frac{i}{2}\delta\varphi \cdot \vec{n}\,\vec{\sigma}$

$\hat{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

$\delta\vec{\varphi} = \delta\varphi\,\vec{n}$

Конечное вращение

$$\delta\Psi(\delta\varphi) = \left(1 + \frac{i}{2}\delta\varphi\,\vec{n}\,\vec{\sigma}\right)\Psi(\varphi=0)$$

$$\frac{\partial\Psi}{\partial\varphi} = \frac{i}{2}\,\vec{n}\,\vec{\sigma}\;\Psi(\varphi=0)$$

$$\Psi(\varphi) = e^{\frac{i}{2}\varphi\vec{n}\vec{\sigma}}\;\Psi(\varphi=0)$$

$\Psi = \hat{S}\chi$

$$\hat{S}\frac{\partial\chi}{\partial\varphi} = \frac{i}{2}\vec{n}\,\vec{\sigma}\;S\chi(\varphi=0) \quad \Big|\cdot S^{-1}$$

$$S^{-1}S\frac{\partial\chi}{\partial\varphi} = \frac{i}{2}\underbrace{S^{-1}\vec{n}\,\vec{\sigma}\,S}_{diag.\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}}\chi(\varphi=0) \longrightarrow \chi(\varphi) = e^{\frac{i}{2}\varphi}\begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{pmatrix}$$

$$\chi(\varphi) = e^{\frac{i}{2}\varphi\begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{pmatrix}}\;\chi(\varphi=0)$$

$$\Psi(\varphi) = S\,e^{\frac{i}{2}\varphi S^{-1}\vec{n}\vec{\sigma}S}\;S^{-1}\,\Psi(\varphi=0)$$

$$S e^{\frac{i}{2} S^{-1} \vec{n} \vec{\sigma} S} S^{-1} = e^{\frac{i}{2} \vec{n} \vec{\sigma}}$$

$\boxed{U = e^{\frac{i}{2} \varphi \vec{n} \vec{\sigma}}}$ – унитарный оператор вращения

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \qquad \langle\psi| = (\psi_1^*, \psi_2^*)$$

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int (|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2)\, dx$$

Теорема: Любая скалярная ф-ция от оператора $\hat{\sigma}$ – это линейная ф-ция от этого оператора.

$$f\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots\ \lambda_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(\lambda_1) & & \\ & f(\lambda_2) & \\ & & \ddots \end{pmatrix}$$

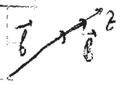
$$f(A) = S f(S^{-1} A S) S^{-1}$$

$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1$

$\left.\begin{array}{l} \sigma_y \sigma_z = i \sigma_x \\ \sigma_z \sigma_x = i \sigma_y \\ \sigma_x \sigma_y = i \sigma_z \end{array}\right\}$ из коммутационных соотношений: $\sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x = i \sigma_z$

$\boxed{\sigma_i \sigma_k + \sigma_k \sigma_i = 2 \delta_{ik}}$ – матрицы Паули антикоммутируют

$f(a + \vec{b}\hat{\sigma}) = \vec{A} + \vec{B}\hat{\sigma}$ ← если разложить в ряд Тейлора

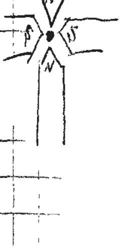


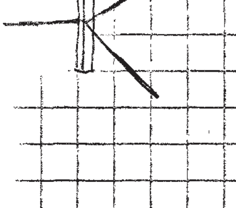
~~$a + b\sigma z$~~ $a + b_z \sigma z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + b_z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

$$\begin{array}{l} f(a+b) = A + B \\ f(a-b) = A - B \end{array} \longrightarrow \quad A = \frac{1}{2}\{f(a+b) + f(a-b)\} \qquad \vec{B} = \frac{1}{2}\{f(a+b) - f(a-b)\}\frac{\vec{b}}{b}$$

Применим эти ф-лы к оператору $U = e^{\frac{i}{2} \vec{n} \vec{\sigma} \varphi} = \cos\frac{\varphi}{2} + i(\vec{n}\vec{\sigma}) \sin\frac{\varphi}{2}$

$a = 0 \qquad \vec{b} = \frac{i}{2} \varphi \vec{n}$





$$U_x = \begin{pmatrix} \cos\frac{\varphi}{2} & i \sin\frac{\varphi}{2} \\ i \sin\frac{\varphi}{2} & \cos\frac{\varphi}{2} \end{pmatrix}$$

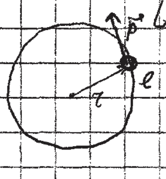
Движение в магнитном поле

① Магнитный момент

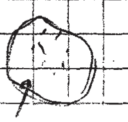
У частицы со спином ∃ магн. момент.

$\hat{L}$ – орбитальный момент

$\vec{L} = [\vec{r} \times \vec{p}] = m[\vec{r}\vec{V}]$



$\vec{\mu} = \frac{e}{2c}[\vec{r}\vec{V}] = \frac{e}{2mc}\vec{L}$



распределение з-дов и токов

$\mathrm{rot}\,\vec{B} = \frac{4\pi}{c}\vec{j}$

$\mathrm{rot}\,\mathrm{rot}\,\vec{A} = \frac{4\pi}{c}\vec{j}$

↓ в калибр. Лор.

↓

$-\Delta\vec{A} = \frac{4\pi}{c}\vec{j}$

$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{1}{c}\int\frac{\vec{j}(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|}d^3\vec{r}'$

$\vec{\mu} = \boxed{\frac{\mu}{s}}\vec{s}$

↑ гиромагн. отношение

$\vec{A} \sim \frac{[\vec{m},\vec{R}]}{R^3}$

для e^-: $\frac{\mu}{s} = \frac{-|e|}{m_0c}$

$J = l + s$

$\vec{\mu} = \frac{eg}{2mc}\vec{s}$ g- фактор, для e^-: $g = 2$

$\vec{\mu} = \mu_Б\vec{\sigma}$ $\boxed{\mu_Б = \frac{e\hbar}{2m_0c}}$ $\vec{s} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$

магнетон Бора

$\vec{\mu} = -\frac{|e|\hbar}{2mc}\vec{\sigma}$

$\mu_я = \frac{e\hbar}{2m_pc}$

$\mu_p = 2{,}89\,\mu_я$

$\mu_n = -1{,}6\,\mu_я$?

$\vec{\mu}_e = -\mu_B\vec{\sigma}$

!!! $q = e = -|e|$

$\frac{\mu}{s} = \frac{-|e|}{}$ $\vec{\mu} = -\frac{|e|\hbar}{2mc}\vec{\sigma}$

Магнитное поле в квант. мех.

$i\hbar\dot{\Psi} = \hat{H}\Psi$

$H(p,q) \longrightarrow \hat{H}(\hat{p},\hat{q})$

класс.

$\{\hat{p},\hat{q}\} = -i\hbar$

$q = \vec{r}$

$p = -i\hbar\nabla$

$H(p,r)$ Св. движ. частицы

$i\hbar\dot{\Psi}\hat{1} = \frac{p^2}{2m}\Psi\hat{1}$

$\vec{p} \to \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \to \hat{H} = \left[\frac{(\hat{p}-\frac{e}{c}\vec{A})^2}{2m} + e\varphi\right]\hat{1} - (\vec{\mu}\vec{B})$

$i\hbar\dot{\Psi}\hat{1} = \hat{H}\Psi$

$$\begin{cases} \hat H = \left[\frac{(\vec p - \frac{e}{c}\vec A)^2}{2m} + e\varphi\right]\underset{\uparrow}{\hat I} + \mu_0(\vec\sigma\vec B) \\ i\hbar\dot\psi\hat I = \hat H\psi\hat I \end{cases}$$

– ур-ние Паули

ед. матрица

В уравнение явно входят векторный и скалярный потенциал.

$$H = \frac{1}{2m}(\vec p - \frac{e}{c}\vec A)^2 + e\varphi$$

$$\dot{\vec r} = \frac{\partial H}{\partial \vec p}$$

$$\dot{\vec p} = -\frac{\partial H}{\partial \vec r}$$

~~$m\ddot{\vec r} = e(\vec E + \frac{1}{c}[\vec v\vec B])$~~

Класс. мех → Калибровочная инвариантность

(gauge)

$\vec B = \mathrm{rot}\,\vec A \qquad \vec E = -\frac{1}{c}\frac{\partial\vec A}{\partial t} - \nabla\varphi$

Калибровочные преобраз.

$A \to A + \nabla f \qquad \varphi \to \varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial f}{\partial t}$ → выражения для полей не изменятся в класс. мех.

$$i\hbar\dot\psi = \hat H\psi$$

$$\hat H = \frac{1}{2m}(\hat p - \frac{e}{c}\hat A)^2 + e\varphi - (\vec\mu\vec B)$$

$\vec\mu = +\mu_B\vec\sigma \qquad \mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$

1 удлин. произв. 2 удл. произв.

$P_{обоб.} = -i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\vec A \qquad i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\varphi$

обобщ. имп-с. простр. и временные производные

$$\vec P - \frac{e}{c}\vec A = -i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\vec A$$

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\varphi\right)\psi$$

Калибр. преобразов. в кв. мех.: $\vec A \to \vec A + \nabla f$

$$\varphi \to \varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial f}{\partial t}$$

$$~~i\hbar~~\ \psi \to \psi e^{i\frac{ef}{\hbar c}}$$

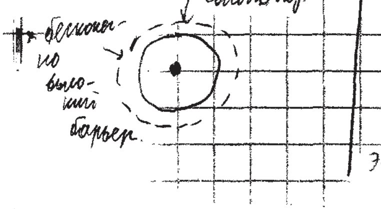
$$\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}A - \frac{e}{c}\nabla f\right)\psi\exp\left\{\frac{ief}{\hbar c}\right\} = \exp\left(\frac{ief}{\hbar c}\right)\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}A\right)\psi$$

$$-i\hbar\nabla e^{\frac{ief}{\hbar c}} = \frac{e}{c}\nabla f$$

Ур-ния кв. механики не могут быть записаны в терминах полей

Если переписать ур-ние Шредингера в терминах полей, мы потеряем св-ва локальности (теория близкодействия)

Эффект Бом-Ааронова.



сечение рассеяния

$$\sigma \sim \sin\frac{\pi\Phi}{\Phi_0}$$

$$\Phi_0 = \frac{hc}{e}$$

e^- чувствует магнитное поле там, где его нет.

$\vec B$ вне соленоида отсутствует,

$\oint \vec A\, d\vec l = \Phi \qquad A_\varphi = \frac{\Phi}{2\pi r}$

! Электрон чувствует векторный потенциал.

$$(\hat{\vec{p}}-\frac{e}{c}\vec{A})^2\psi=(\hat{\vec{p}}-\frac{e}{c}\vec{A})(\hat{\vec{p}}-\frac{e}{c}\vec{A})\psi=\hat{p}^2+\frac{e^2}{c^2}\hat{A}^2-\frac{e}{c}(\hat{p}\vec{A}+\vec{A}\hat{p})$$

$$\{\hat{\vec{p}},\vec{A}\}=(\hat{\vec{p}}\vec{A}-\hat{\vec{A}}\hat{\vec{p}})\psi=(-i\hbar\nabla\vec{A}-\vec{A}(-i\hbar\nabla))\psi=-i\hbar\,\mathrm{div}\vec{A}\,\psi$$

$$\boxed{\{\hat{\vec{p}}\,\vec{A}\}=-i\hbar\,\mathrm{div}\,\vec{A}}$$

$\mathrm{div}\vec{A}=0$ – калибровка Кулона

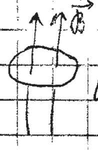
$\dot{A}=\frac{i}{\hbar}\{\hat{H}\hat{A}\}$ $\qquad \hat{\vartheta}=\frac{i}{\hbar}\{\frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\vec{A})^2,\vec{r}\}=\frac{1}{m}(\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A})$

$$\{\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A}\}(\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A})\cdot r-r(\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A})(\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A})=\frac{1}{m}(p-\frac{e}{c}A)\{\vec{p}\,\vec{r}]$$

$\{V_x V_y\}=i(\frac{e\hbar}{mc}\cdot\frac{\hbar}{m})B_z$
$\{V_y V_z\}=i(\quad)B_x$
$\{V_z V_x\}=i(\quad)B_y$

– ~~ст~~ компоненты скорости не коммутируют

в классике:



$\omega_H=\frac{eB}{mc}$

Задача о движении заряж. частицы в однородном магнитном поле.

$\vec{z}_0\vec{B}=\vec{B}=\mathrm{const}$ $\qquad \varphi=0$

Выберем $\vec{A}$ в виде $A_x=-By$ $\quad A_y=A_z=0$ $\qquad$ {Можно выбрать $A_x=0$ $A_y=Bx$ $A_z=0$}

$$B=\begin{vmatrix}\vec{x}_0&\vec{y}_0&\vec{z}_0\\ \frac{\partial}{\partial x}&\frac{\partial}{\partial y}&\frac{\partial}{\partial z}\\ By&0&0\end{vmatrix}=\frac{\partial By}{\partial y}=\vec{B}\vec{z}_0$$

$f=Bxy$

$A_x=-\lambda By$ $\quad A_y=(1-\lambda)Bx$ $\quad A_z=0$

$e=-|e|$

калибровки, в которых $A_z=0$ и $A_x=0$ (или $A_y=0$) – назыв. калибр. Ландау.

$e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ $\qquad \hat{H}\psi=\{\frac{1}{2m}[(p_x+\frac{eB}{c}y)^2+p_y^2+p_z^2]\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}-\mu_\sigma\vec{B}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}$

$-\mu_B\vec{B}$
$+\mu_B\vec{B}$

$s_z=\sigma=\pm\frac{1}{2}$

$\Delta E=2\mu_B B=\frac{e\hbar}{mc}B=\hbar\omega_H=2\sigma\omega$

$$H\psi=\{\frac{1}{2m}[(p_x+\frac{eB}{c}y)^2+p_y^2+p_z^2]-\sigma\hbar\omega_H\}\psi=E\psi$$

т.к. нет зав-ти от x и z, то:

$$\psi=\Phi(y)\cdot e^{ik_x x+ik_z z}$$

$$\left[\frac{1}{2m}\left(\hbar K_x+\frac{eB}{c}y\right)^2-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\hbar^2}{2m}K_z^2\right]\Phi_{(y)}=(E+2\sigma\hbar\omega_H)\Phi_{(y)}$$

$$y_H=y+\underbrace{\boxed{\frac{\hbar c}{eB}K_x}}_{-y_0}=y-y_0$$

тогда

$$\frac{\cancel{\hbar^2}}{2m}\left(\frac{eB}{c\cancel{\hbar}}\right)^2y_H^2-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y_H^2}=\left(E+\sigma\hbar\omega_H-\frac{p_z^2}{2m}\right)\Phi$$

$$\left[\frac{m\omega_H^2}{2}y_{H}^2-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right]\Phi=\varepsilon\Phi$$

$$\varepsilon=\hbar\omega_H\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

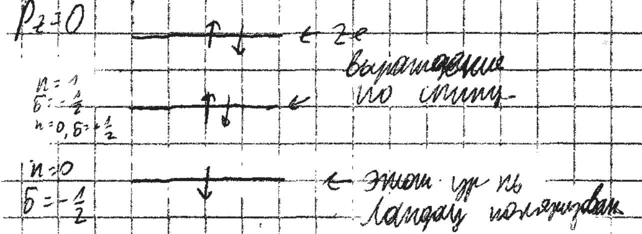
$$\boxed{E=\frac{p_z^2}{2m}+\hbar\omega_H\left(n+\frac{1}{2}+\sigma\right),\quad \sigma=\pm\frac{1}{2}}$$

$$\hbar\omega_H\left[\frac{m\omega_H}{2\hbar}y_H^2-\frac{\hbar}{2m\omega_H}\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right]\Phi=\varepsilon\Phi$$

l_H - магнитная длина. $\quad l_H=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_H}}$

$$\frac{1}{2}\left(\frac{y}{l_H}\right)^2-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial\left(y/l_H\right)^2}\qquad \Phi\sim e^{-\frac{(y-y_0)^2}{2l_H^2}}H_n\left(\frac{y-y_0}{l_H}\right)\qquad y_0=-\frac{\hbar c K_x}{eB}$$

Оценим вырождение каждого ур-ня Ландау.



Все состояния вырождены по K_x

$$x,y,z,S \to K_x\, n\, K_z\, \sigma$$

y_0 - координата ведущего центра.

$y_H=y-y_0$ $\qquad$ Если определить

$$\hat{x}_0=\frac{\hbar c\hat{K}_y}{eB}+x$$

$$\hat{y}_0=\frac{\hbar c\hat{K}_x}{eB}+y$$

$$\{x_0,y_0\}_-\neq 0$$