



ФИЗИЧЕСКИЙ  
ФАКУЛЬТЕТ  
МГУ ИМЕНИ  
М.В. ЛОМОНОСОВА



ФОНД  
ВОЛЬНОЕ ДЕЛО

*teach-in*  
ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

# АТОМНАЯ ФИЗИКА

КЛЕНОВ  
НИКОЛАЙ ВИКТОРОВИЧ

ФИЗФАК МГУ

КОНСПЕКТ ПОДГОТОВЛЕН  
СТУДЕНТАМИ, НЕ ПРОХОДИЛ  
ПРОФ. РЕДАКТУРУ И МОЖЕТ  
СОДЕРЖАТЬ ОШИБКИ.  
СЛЕДИТЕ ЗА ОБНОВЛЕНИЯМИ  
НА [VK.COM/TEACHINMSU](https://vk.com/teachinmsu).

ЕСЛИ ВЫ ОБНАРУЖИЛИ  
ОШИБКИ ИЛИ ОПЕЧАТКИ,  
ТО СООБЩИТЕ ОБ ЭТОМ,  
НАПИСАВ СООБЩЕСТВУ  
[VK.COM/TEACHINMSU](https://vk.com/teachinmsu).



БЛАГОДАРИМ ЗА ПОДГОТОВКУ КОНСПЕКТА  
СТУДЕНТА ФИЗИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА МГУ  
**ГУЩИНА ДМИТРИЯ АЛЕКСАНДРОВИЧА**



## Содержание

<b>Лекция 1</b>	<b>7</b>
<b>1 Корпускулярно-волновой дуализм</b>	<b>7</b>
1.1 Предмет изучения атомной физики. . . . .	7
1.2 Электромагнитное излучение и корпускулярно-волновой дуализм. . .	7
1.3 Равновесное электромагнитное излучение, вывод формулы Планка . .	11
1.4 Эффект Комптона . . . . .	12
1.5 Опыты, доказывающие волновую парадигму . . . . .	13
<b>Лекция 2</b>	<b>15</b>
<b>2 Корпускулярно-волновой дуализм</b>	<b>15</b>
2.1 Опыты по определению приоритетной парадигмы . . . . .	15
2.2 Основные положения корпускулярно-волнового дуализма . . . . .	16
2.3 Волна де Бройля . . . . .	16
2.4 Воздействие измерителя на объект . . . . .	17
2.5 Опыт с рассеянием света на электроны . . . . .	19
<b>Лекция 3</b>	<b>20</b>
<b>3 Основные понятия квантовой механики</b>	<b>20</b>
3.1 Положения квантовой механики в нашем курсе . . . . .	20
3.2 Операторы физических величин . . . . .	22
3.2.1 Оператор координаты . . . . .	22
3.2.2 Оператор импульса . . . . .	22
3.3 Пример волновой функции . . . . .	23
<b>Лекция 4</b>	<b>24</b>
<b>4 Основные понятия квантовой механики</b>	<b>24</b>
4.1 Коммутаторы . . . . .	24
4.2 Оператор момента количества движения . . . . .	25
4.3 Оператор Гамильтона . . . . .	26
4.3.1 Стационарное уравнение Шрёдингера, где $U$ - не зависит от времени . . . . .	27
4.3.2 Абсолютно свободная частица движется в пространстве, где $U(x)=0$ . . . . .	28
4.3.3 Собственные функции и собственные значения оператора Га- мильтона . . . . .	28
<b>Лекция 5</b>	<b>30</b>
<b>5 Потенциальная яма и гармонический осциллятор</b>	<b>30</b>
5.1 Финитное движение электрона . . . . .	30
5.2 Яма с барьером . . . . .	31

5.3	Одномерный гармонический осциллятор . . . . .	32
5.3.1	Осцилляторная теорема . . . . .	33
5.4	Примеры . . . . .	34
<b>Лекция 6</b>		<b>36</b>
<b>6</b>	<b>Потенциальный барьер</b>	<b>36</b>
6.1	Поток плотности вероятности . . . . .	36
6.2	Потенциальные барьеры . . . . .	37
6.2.1	Потенциальный барьер ступенька . . . . .	37
6.2.2	Потенциальный барьер конечной ширины . . . . .	38
6.2.3	Барьер сложной формы . . . . .	39
6.3	Квазиклассическое приближение . . . . .	39
6.4	Эффективный импульс . . . . .	41
6.5	Квазистационарные состояния . . . . .	42
<b>Лекция 7</b>		<b>44</b>
<b>7</b>	<b>Движение в центрально-симметричном поле</b>	<b>44</b>
7.1	Оператор Гамильтона в центрально-симметричном поле . . . . .	44
7.1.1	Интегралы движения в центрально-симметричном поле . . . . .	44
7.1.2	Разделение переменных . . . . .	45
7.2	Водородо-подобный ион . . . . .	46
<b>Лекция 8</b>		<b>49</b>
<b>8</b>	<b>Атом водорода</b>	<b>49</b>
8.1	Асимптотические решения для атома водорода . . . . .	49
8.2	Большие квантовые числа . . . . .	50
8.3	Атом водорода по Бору . . . . .	53
8.4	Эксперименты . . . . .	54
<b>Лекция 9</b>		<b>56</b>
<b>9</b>	<b>Спин. Спин-орбитальное взаимодействие</b>	<b>56</b>
9.1	Магнитный момент . . . . .	56
9.2	Эксперимент Штерна - Герлаха . . . . .	56
9.3	Оператор спина . . . . .	57
9.4	Полный момент количества движения . . . . .	59
9.5	Теория возмущений . . . . .	60
<b>Лекция 10</b>		<b>62</b>
<b>10</b>	<b>Спин-орбитальное взаимодействие</b>	<b>62</b>
10.1	Оценка возмущения . . . . .	62
10.2	Тонкая структура . . . . .	64
10.3	Сверхтонкая структура . . . . .	65

10.4	Многоэлектронные системы . . . . .	66
10.5	Принцип тождественности частиц . . . . .	66
<b>Лекция 11</b>		<b>68</b>
<b>11</b>	<b>Метод самосогласованного поля</b>	<b>68</b>
11.1	Бозоны и фермионы . . . . .	68
11.2	Метод самосогласованного поля . . . . .	69
11.3	Учёт межэлектронного взаимодействия . . . . .	71
11.4	Уровни энергии . . . . .	72
<b>Лекция 12</b>		<b>74</b>
<b>12</b>	<b>Тонкая структура</b>	<b>74</b>
12.1	Энергия термов . . . . .	74
12.2	Тонкая структура . . . . .	75
12.3	Переход между состояниями . . . . .	77
<b>Лекция 13</b>		<b>80</b>
<b>13</b>	<b>Дипольное приближение. Правила отбора</b>	<b>80</b>
13.1	Переход между состояниями . . . . .	80
13.2	Правила отбора в различных квантовых системах . . . . .	82
13.2.1	1D - гармонический осциллятор . . . . .	82
13.2.2	[H]-ион . . . . .	83
<b>Лекция 14</b>		<b>87</b>
<b>14</b>	<b>Квантовое электромагнитное поле</b>	<b>87</b>
14.1	Моды электромагнитного осциллятора . . . . .	87
14.2	Классическое электромагнитное поле . . . . .	89
14.3	Эффект Казимира . . . . .	91
<b>Лекция 15</b>		<b>93</b>
<b>15</b>	<b>Лэмбовский сдвиг. Атом в магнитном поле</b>	<b>93</b>
15.1	Эффект Лэмба-Резерфорда . . . . .	93
15.2	Лэмбовская поправка . . . . .	94
15.3	Взаимодействие атома с магнитным полем . . . . .	95
15.3.1	Взаимодействие с сильным магнитным полем . . . . .	96
15.3.2	Взаимодействие со слабым магнитным полем . . . . .	97
<b>Лекция 16</b>		<b>98</b>
<b>16</b>	<b>Физика молекул</b>	<b>98</b>
16.1	Взаимодействие атома с магнитным полем . . . . .	98
16.1.1	Взаимодействие со слабым магнитным полем . . . . .	98

16.2	Различные наблюдаемые эффекты . . . . .	100
16.2.1	Эффект Пашена-Бака . . . . .	100
16.2.2	Электронный парамагнитный резонанс . . . . .	100
16.2.3	Эффект Штерна-Герлаха . . . . .	100
16.3	Физика молекул . . . . .	101
16.3.1	Адиабатическое приближение . . . . .	102

## Лекция 1

### 1 Корпускулярно-волновой дуализм

#### 1.1 Предмет изучения атомной физики.

Основной объект изучения – системы, имеющие атомарные и субатомарные размеры. Характерный размер объектов – размеры атомов. Можно оценить размер атомов самостоятельно, в домашних условиях, например, используя подсолнечное масло и воду. Измеряем как можно точно объём подсолнечного масла и наливаем эту каплю на воду. Дожидаемся, когда капля перестанет растекаться по поверхности, и считая, что толщина слоя примерно равна размеру молекулы, находим необходимый нам результат, при помощи расчётов и линейки (зная объём и площадь поверхности масла).

Радиус атома:  $r_a \approx 10^{-8}$  см = 1 Å (ангстрем)

Работать будем в системе СГС, в этой системы уравнения Максвелла представляются более упрощённом виде, и напряженность электрического и магнитного поля имеют одинаковую размерность. Наш объект исследования помимо атома - электрон – составная часть атома. Характерные масштабы величины электрического заряда и массы.

$e^- \approx 4.9 \cdot 10^{-10}$  СГСЭ

$m \approx 9,1 \cdot 10^{-28}$  г

В рамках курса будем развивать положения квантовой механики. Упор будет сделан на изучение системы из нескольких частиц (одной частицей занимались в прошлом году) + поведение этих частиц в электромагнитном поле. Напомним, что основную информацию о веществе мы получаем через излучение от атома.

#### 1.2 Электромагнитное излучение и корпускулярно-волновой дуализм.

Существуют две парадигмы представления света – корпускулярная (свет представляется как поток частиц – корпускул) и волновая парадигма, в рамках которой свет представляют в виде электромагнитных волн. Рассмотрим ряд экспериментов, с точки зрения проверки истинности корпускулярной или волновой теории.

##### 1) Опыты по фотоэффекту

**Атомный фотоэффект**, открытый Герцем ещё до XIX века, - это эффект, при котором электромагнитное излучение вырывает электроны из атомов. Позже был исследован **металлический фотоэффект** - электроны вырываются не из отдельных атомов, а с поверхности металлических электродов.

Рассмотрим результаты фотоэффекта (на рис. 1 представлена установка)

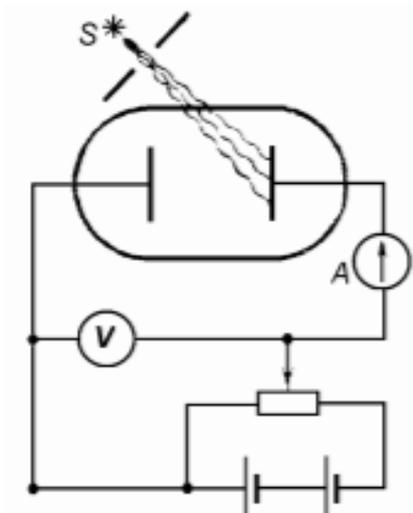


Рис. 1: Вакуумная трубка

Опыт Столетова - наблюдение фотоэффекта. Распространённая ошибка среди студентов - неправильный ответ на вопрос: сам по себе фотоэффект, может ли служить свидетельством справедливости корпускулярной парадигмы? Правильный ответ - нет, не может. Волновая парадигма говорит, что у нас в веществе имеются заряды - электроны, некоторая сила удерживает их там. Будем действовать на эти электроды электромагнитным полем. На электрон будут действовать кулоновская и лоренцова сила, очевидно, что поле будет раскачивать электрон. Ну и если раскачает достаточно хорошо, то электроны будут вылетать из электрода.

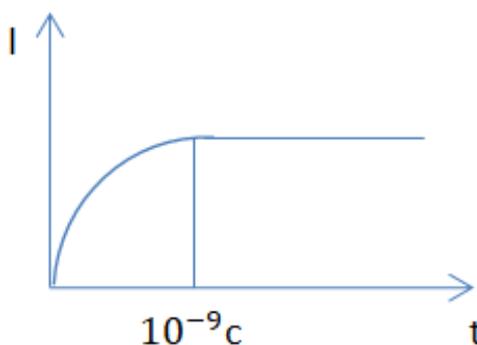


Рис. 2: Постоянная интенсивность

Обратимся к результатам опытов по изучению фотоэффекта. График зависимости силы тока от времени при постоянной интенсивности рис. 2 даёт повод задуматься сторонникам волновой парадигмы. На графике есть промежуток нарастания фототока (достигается примерно за  $10^{-9}$  с) и выход фототока на "плато". Можно

рассчитать, какое количество периодов нужно колебать электрон, чтобы он с большей вероятностью вылетел из металла, и это время, должны быть больше чем  $10^{-9}$  с. Но это тоже не убедительное доказательство той или иной парадигмы.

Также можно измерить вольт-амперные характеристики при разных интенсивностях падающего электромагнитного излучения. В области положительных значений  $V$ , (ускоряющий потенциал) мы получаем период нарастания с выходом на ток насыщения. Величина тока насыщения, однако, линейно зависит от интенсивности излучения. Чем больше интенсивность, тем больше электронов покидает поверхность металла, тем больше ток насыщения.

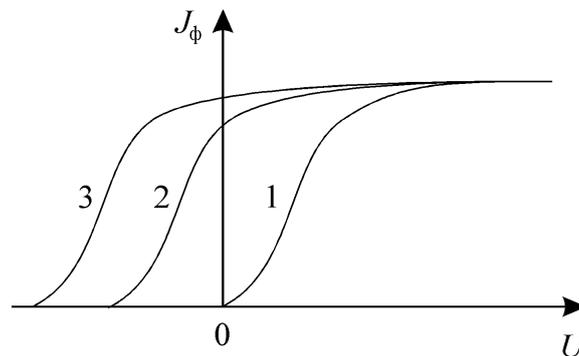


Рис. 3: Вольт-амперная характеристика

Если к системе падает тормозящий потенциал, то в этом случае фототок уменьшается и при некотором напряжении ( $V_3$ - запирающее напряжение) обращается в нуль, что соответствует случаю, когда ни один из электронов не смог достичь поверхности противоположного электрода. Это понятно: существует некоторое значение максимальной кинетической энергии фотоэлектронов.

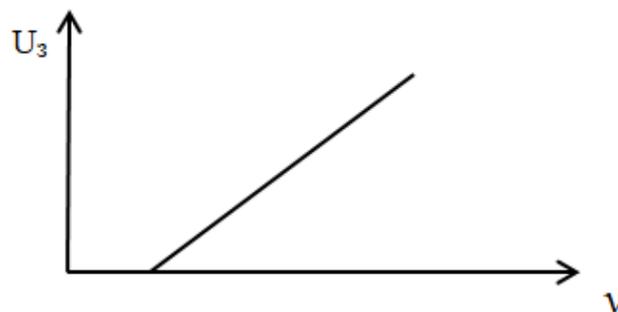


Рис. 4: Запирающее напряжения от частоты

Но тут есть нюанс, для разных значений интенсивности, мы будем получать одно и тоже значение запирающего напряжения. Вспомним характеристики электрона в

электромагнитном поле из курса электродинамики. Оценка его скорости:  $v \simeq \frac{e \cdot \varepsilon}{m \cdot \omega}$  ( $\varepsilon$  - напряженность электрического поля). Как мы видим, скорость зависит от напряженности электрического поля прямо пропорционально, но и интенсивность пропорциональна квадрату напряженности электрического поля. То есть, казалось бы, чем больше интенсивность падающего излучения, тем большую кинетическую энергию могут набирать электроны, и тем труднее их остановить запирающему потенциалу. Эксперимент показывает обратное: запирающее напряжение, а, значит, и максимальная кинетическая энергия фотоэлектронов не зависят от интенсивности излучения.

Рассмотрим еще зависимость величины запирающего напряжения от частоты излучения (полученную при постоянной интенсивности излучения). Как видно, с увеличением частоты излучения величина запирающего напряжения линейно растет, что свидетельствует о возрастании с частотой энергии фотоэлектронов. Самое интересное, что существует некоторое минимальное значение частоты излучения  $\omega_{min}$  (красная граница фотоэффекта).

Есть некоторые нюансы: 1) Существует многофотонной фотоэффект, то есть электроны вылетали с электродов при частотах, которые были в разы меньше частоты красной границы фотоэффекта. Как ясно из названия, это процесс, при котором несколько фотонов два, три и т.д., выбивают один электрон. 2) Вроде бы все предыдущие высказывания - доказательство корпускулярной природы света, но не совсем так. В XX веке в работах Лэмба и Скали было продемонстрировано, что можно описать все экспериментально наблюдаемые эффекты, в рамках теории, где свет - это электромагнитная волна, а электрон - это такая система, в которой электроны могут принимать некоторые разрешённые значения энергии.

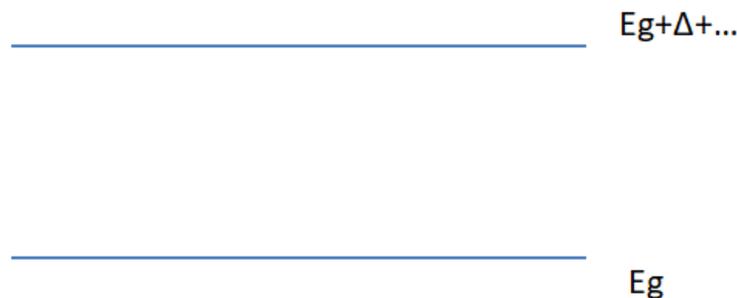


Рис. 5: Квантование энергии электрона

Эти значения энергии квантуются, принимая значения  $E_g$ ,  $E_g + \Delta$ ,  $E_g + 2\Delta$  и так далее (рис.5). Красная граница фотоэффекта, объясняется в данном предположении тем, что энергия падающего излучения должна быть больше  $\Delta$ .

### 1.3 Равновесное электромагнитное излучение, вывод формулы Планка

Рассмотрим равновесное электромагнитное излучение при температуре  $T$ . А что это значит, при температуре  $T$ ? Рассмотрим резервуар температуры  $T$  (рис.6), и представим, что в нём есть маленькое отверстие. Через него в наш "термостат" попадает электромагнитное излучение, и внутри этого ящика как раз и будет находиться равновесное электромагнитное излучение с температурой  $T$ . Важнейшей характеристикой равновесного излучения – распределение энергии по спектру, которое задается функцией  $\rho_\omega$  - спектральной плотностью энергии электромагнитного поля. Величина  $\rho_\omega d\omega$  определяет величину энергии поля в единице объема в спектральном интервале от  $\omega$  до  $\omega + d\omega$ , а интеграл по всему спектру есть объемная плотность энергии поля.

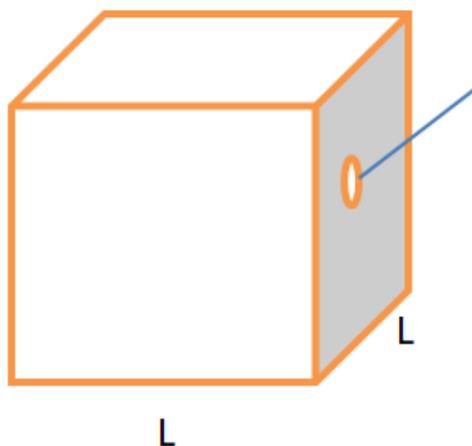


Рис. 6: Резервуар, температуры  $T$

Спектральная плотность энергии в единице объёма:  $\rho_\omega d\omega = \frac{\langle E_\omega \rangle \cdot d\eta_\omega}{L^3}$ , где  $\langle E_\omega \rangle$  - средняя энергия одной моды, а  $d\eta_\omega$  - число мод, приходящихся в частотный диапазон от  $\omega$  до  $\omega + d\omega$ .

$\langle E_\omega \rangle = \frac{\int E \cdot f(E) dE}{\int f(E) dE}$ , где  $f(E)$  - функция распределения по энергии.

$f(E) \sim \text{const} \cdot \exp\left(\frac{-E}{k_b T}\right)$  - распределение Больцмана.

Интегрируя, получаем:  $\langle E_\omega \rangle = k_b T$

Открываем учебник Поповой и Тихоновой, можно найти способ получения формулы для:  $d\eta_\omega = \frac{\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3}$  При низких частотах, всё хорошо, но при больших значениях мы приходим к "ультрафиолетовой катастрофе".

Корпускулярная концепция: заменяем интеграл на суммирование (энергия характеризуется числом частичек):

$$E_n = n E_0^{(\omega)} \quad (1)$$

$$\langle E_\omega \rangle = \frac{\sum E_n \cdot \exp\left(\frac{-E_n}{k_b T}\right)}{\sum \exp\left(\frac{-E_n}{k_b T}\right)} = E_0^{(\omega)} \frac{\sum n \cdot \exp(-xn)}{\sum \exp(-xn)} = E_0^{(\omega)} \cdot \frac{-\frac{dB}{dx}}{B} \quad (2)$$

где  $B = \frac{1}{1 - e^{-x}}$

Из опытов Вина:  $E_0(\omega) = \hbar\omega$  ( необходима  $\sim \omega$  для совпадения с экспериментальными результатами ),  $\hbar \sim 10^{-27}$  эрг·с - это коэффициент, для более точного совпадения с экспериментальными результатами. Тогда

$$\rho_\omega = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \cdot \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1} \quad (3)$$

На рис.7 приведен общий вид планковской функции (кривая 1), а также ее предельных случаев, рассчитанных по формулам Релея и Джинса (кривая 2) и Вина (кривая 3). Итак, чисто волновое описание - неполное, но строгим доказательством формула Планка быть не может, так как она была выведена задним числом подгонкой к готовым экспериментальным результатам.

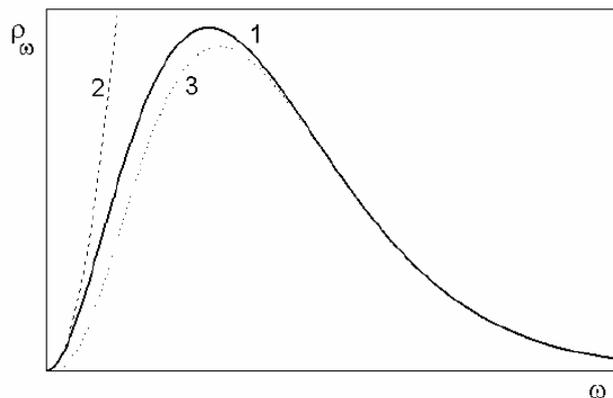


Рис. 7: Равновесное излучение

## 1.4 Эффект Комптона

Эффект Комптона- рассеяние электромагнитного излучения на покоящемся электро-не. Для вывода формулы, необходимо записать

З.С.Э:

$$\hbar\omega_0 + mc^2 = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} + \hbar\omega \quad (4)$$

З.С.И.:

$$\hbar\vec{k}_0 = \vec{p} + \hbar\vec{k} \quad (5)$$

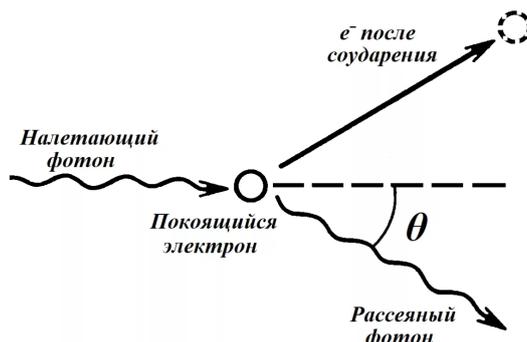


Рис. 8: Эффект Комптона

Из уравнений 4 и 5, можно получить формулу Комптона:

$$\lambda - \lambda_0 = \lambda_c(1 - \cos\theta) \quad (6)$$

где  $\lambda_c = \frac{2\pi\hbar}{mc}$  - комптоновская длина волны

Но тогда можно же поставить опыт и изучать зависимость длины волны от угла, и если она будет изменяться по формуле 6, то будет справедлива корпускулярная теория!!! Но это фундаментально неправильный ответ, так как необходимо ещё и рассмотреть, что по этому поводу говорит волновая теория.

Рассмотрим волновую теорию:(нулевое приближение)

$$F_{\text{lor}} = 0$$

$E(\mathbf{r})=E$  - не зависит от координаты

Сила электромагнитного трения - волна передаёт энергию электрону. Она его толкает, и оценочно скорость электрона  $v \simeq \frac{e \cdot \varepsilon}{m \cdot \omega}$  уже обсуждалась. Но мы также должны учитывать эффект Доплера

$$\omega \sim \omega_0(1 - \frac{v_e}{c}) \quad (7)$$

где  $\omega_e$  - частота, с которой раскачивается электрон в своей системе.

Но наши измерения проводятся в лабораторной системе:

$$\omega \sim \omega_e(1 + \frac{v_e}{c}\cos\theta) \quad (8)$$

так как важна проекция скорости на нужное направление. Тогда получаем формулу:

$$\lambda - \lambda_0 \sim \frac{v_e}{c}(1 - \cos\theta) \quad (9)$$

## 1.5 Опыты, доказывающие волновую парадигму

Рассмотрим явление интерференции с двух точек зрения: корпускулярной и волновой.

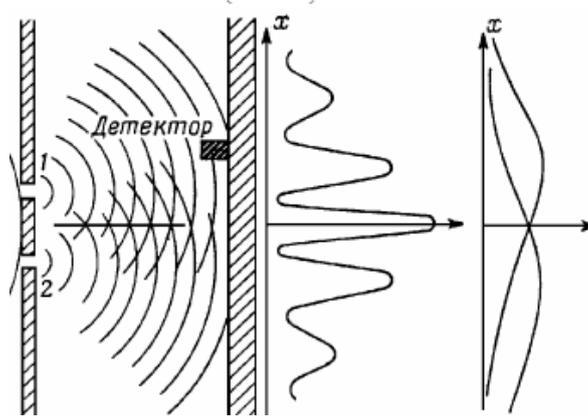


Рис. 9: Картины интенсивностей

Корпускулярная - соответствует правый график на рис.9. (большое количество фотонов напротив отверстий и часть как бы "отражается от стенок")

Волновая теория: как и в оптике наблюдение интерференции (волны когерентны и так далее)

$$\Delta = 2d \sin \theta \Rightarrow \Delta \varphi = \omega \cdot \frac{\Delta}{c} \quad (10)$$

где  $2d$  - расстояние между щелями,  $\Delta$  - разность хода (стандартные обозначения)

$$E = E_1 + E_1 e^{i\Delta\varphi} = E_1 \cdot e^{i\frac{\Delta\varphi}{2}} (e^{i\frac{\Delta\varphi}{2}} + e^{-i\frac{\Delta\varphi}{2}}) \quad (11)$$

Тогда в результате приходим:

$$|E|^2 \sim |E_1|^2 \cos^2\left(\frac{\omega}{c} d \sin \theta\right) \quad (12)$$

## Лекция 2

### 2 Корпускулярно-волновой дуализм

#### 2.1 Опыты по определению приоритетной парадигмы

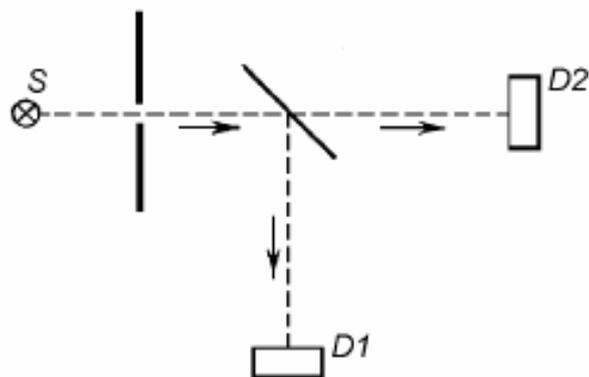


Рис. 10: Опыт на срабатывание датчиков

Был предложен опыт по определению парадигм: свет- это волна или поток корпускул. На рис.10 изображена схема эксперимента. Цуги волн или частицы делятся на зеркале пополам, а счётчики находятся на одинаковом расстоянии. Смотрят на счётчики: в одно и то же время срабатывают они или нет. Вводится коэффициент совпадения:

$$K = \frac{P_{совп}}{P_1 \cdot P_2} \quad (13)$$

где  $P_{совп}$  -вероятность одновременного срабатывания датчиков, а  $P_1$  и  $P_2$  определяются следующим образом:

$$P_i = \frac{N_i}{T \Delta t_i} \quad (14)$$

где  $T$  - время эксперимента, а  $\Delta t_i$  - временное разрешение прибора.

(Дискретное срабатывание датчиков D1 и D2 нам не говорит об верности той или иной парадигмы)

Итак, если свет - это волна, то  $K \gg 1$ , так как волна проходит и отражается, а длина пути одинакова. Если же свет - поток корпускул, то  $K \ll 1$ , так как фотон либо отражается с вероятностью 50%, либо с вероятностью 50% проходит через зеркало, и срабатывает либо первый, либо второй датчик.

а) 1956г. - Х-Б и Твисс -  $K \approx 2$ . О справедливости той или иной теории ничего сказать нельзя. Было выдвинуто предположение о плохом источнике излучения в данном эксперименте.

б) Лазерный источник -  $K \approx 1$

Было выдвинуто объяснение с волновой точки зрения, обоснованное на разрешённых уровнях энергии в материи.

в) Грейнджер и Аспер (источник от излучения на "холодных" атомах).  $K \approx 0$  - что как бы доказывало корпускулярную теорию.

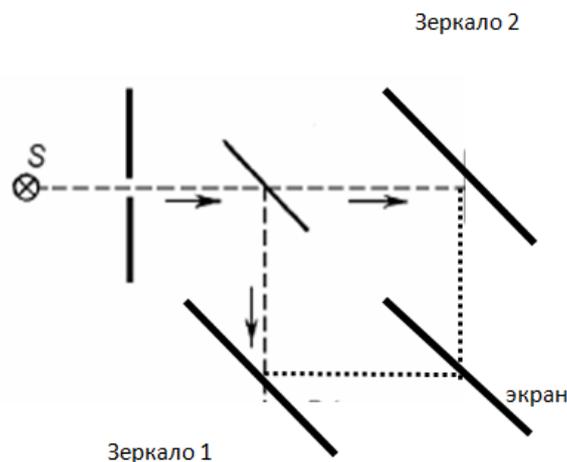


Рис. 11: Опыт на наблюдение картины

Но решили усложнить эксперимент и поставить 2 зеркала, одно из которых было неподвижным, а второе подвижное рис.11, но использовался тот же источник, что и в опытах Грейнджера и Аспера. Результатом опыта была интерференционная картина на экране ( для наблюдения картины менялось положение зеркала).

## 2.2 Основные положения корпускулярно-волнового дуализма

Сформулируем основные положения корпускулярно-волнового дуализма:

1. Электромагнитное излучение описывается с помощью полей  $\vec{E}(r, t)$  и  $\vec{H}(r, t)$ , подчиняющихся уравнениям Максвелла.
2.  $\frac{E^2 + H^2}{8\pi}$  - задаёт вероятность обнаружить в момент времени  $t$  в точке с координатой  $\vec{r}$  фотон с энергией  $\hbar\omega$ .
3. Если величина  $\frac{E^2 + H^2}{8\pi}$  - велика, мы переходим к классическому описанию излучения в рамках волновой теории.

## 2.3 Волна де Бройля

Ассиметрия между полем и веществом - это не хорошо. Сформулируемая концепция корпускулярно-волнового дуализма применима только для полей, поэтому её необходимо обобщить к веществу. Свободная частица характеризуется импульсом. В волновой теории частице ставится волна  $\Psi$

$$\Psi \sim Ae^{i(k_D x - \omega_D t)} \Rightarrow Ae^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} \quad (15)$$

где  $k_D$  и  $\omega_D$  - дебройлевские характеристики.

$$p = \frac{h}{\lambda_D} \quad (16)$$

Но есть ли опыты, подтверждающие волновые свойства? Для электрона дифракционной решёткой может служить кристалл, и в опытах Дэвисона-Джерми, Томпсона наблюдалась дифракция (интерференция) электронов. Но было множество вопросов к данным опытам, так как такие явления могли быть вызваны взаимодействием между собой электронов, поэтому необходимо было для большей достоверности уменьшать интенсивность потока частиц

Опыт Тономура - максимально приближен к опыту Юнга. Классический схема Юнга - результат эксперимента - интерференционная картина. На экране в течение 10-20 мин наблюдались дискретные события - попадание электрона, но конечная картина была интерференционной и хорошо описывалась с помощью волновой теории. Но возникает вопрос, может быть это свойство чисто электронов? Но были также поставлены опыты и с ультрахолодными нейтронами, и для потоков атомов, и для фуллеренов, и даже для кусочков органических молекул. Все эти опыты давали интерференционные картины.

Волна - нелокализована, а картины наблюдались в ограниченном пространстве.

## 2.4 Воздействие измерителя на объект

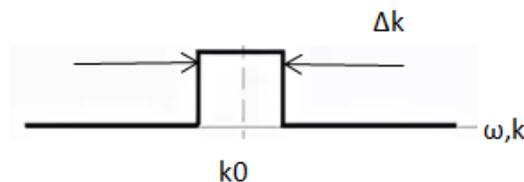


Рис. 12: Частотный интервал

$$U(x, t) \sim \int_B^A a_k \cos(\omega t - kx) dk \quad (17)$$

где  $B = k_0 - \frac{\Delta k}{2}$ ,  $A = k_0 + \frac{\Delta k}{2}$

Преобразование Фурье прямоугольного импульса рис.12 изображено на рис.13

$\Delta x$  - ширина на полувысоте.

$$\Delta x \cdot \Delta k \geq \pi \quad (18)$$

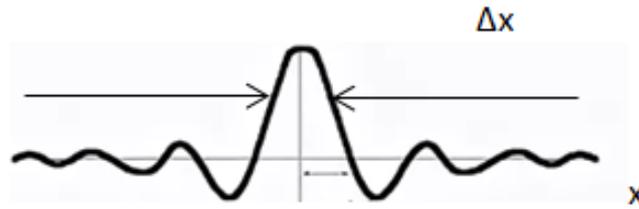


Рис. 13: Преобразование Фурье

Поделив последнее уравнение на характерный масштаб  $\Delta t$ , получим:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{h}{2} \quad (19)$$

Если наша частица - это хорошо локализованный волновой пакет, то мы тогда плохо определяем её импульс, и наоборот.

Микроскоп - линза, но она не собирает лучи в одну точку (рис.14).

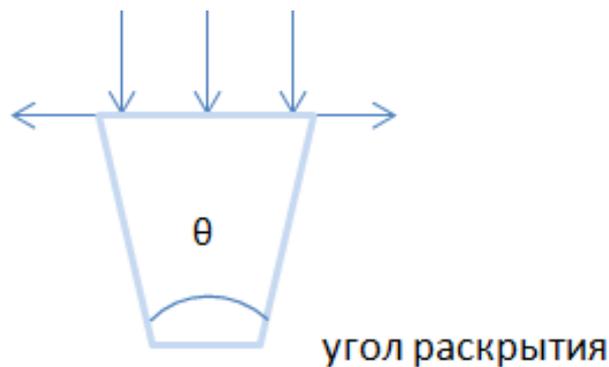


Рис. 14: Микроскоп

$$\Delta x = \frac{\lambda}{2 \sin \frac{\theta}{2}} \approx \frac{\lambda}{\theta} \quad (20)$$

Падающие фотоны возмущают объект исследования:

$$\Delta p_x = p \cdot \sin \frac{\theta}{2} \approx \frac{p\theta}{2} \quad (21)$$

$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\lambda}{\theta} \cdot \frac{p\theta}{2} = \frac{\lambda p}{2} \quad (22)$$

Предел последовательности измерений при стремлении возмущений к нулю существует, и такой результат принято считать истинным. Но  $\lambda$  и  $p$  связаны:  $\lambda = \frac{h}{p}$ ,

получаем  $\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2}$  - константа, малая с точки зрения классической физики, и большая с точки зрения физики микромира. Таким образом в атомной физике всегда есть понятие о воздействии измерителя на объект и практически никогда величина этого воздействия не стремится к нулю.

## 2.5 Опыт с рассеянием света на электроне

Обычная схема Юнга рис.9 в которой используется источник электронов, но в промежутке между экраном и щелями находится излучатель фотонов. Через рассеяние света можно попытаться определить, через какое отверстие 1 или 2 прошёл электрон. Необходимое условие для регистрации  $\lambda < d$ .

Тогда:

$$p_f = \frac{2\pi\hbar}{\lambda_f} \geq \frac{2\pi\hbar}{d} \quad (23)$$

$$\Delta p_e \geq p_f \geq \frac{2\pi\hbar}{d} \quad (24)$$

$$\Delta\theta = \frac{\Delta p_e}{p_e} \geq \frac{2\pi\hbar}{dp_e} = \frac{\lambda}{d} \quad (25)$$

Если в эксперименте мы увидели, как электрон проходит через какое-то отверстие, то есть пронаблюдали корпускулярные свойства, то заведомо нельзя обнаружить волновые свойства и наоборот - это принцип дополнительности.

То есть, в одном эксперименте проявляется либо волновая, либо корпускулярная природа.

Эйнштейн предложил измерять импульс экрана с щелями в предыдущем опыте, так как электрон должен передать импульс при прохождении, и таким образом можно было бы определить, через какую щель прошёл электрон. Но, приобретая информация об импульсе, мы теряем информацию о положении отверстий 1 и 2 на экране.

## Лекция 3

### 3 Основные понятия квантовой механики

#### 3.1 Положения квантовой механики в нашем курсе

Для описания электрона необходимо описать скалярное поле  $\Psi(r, t)$  - задаёт вероятность обнаружения электрона в точке  $r$  в момент  $t$ .

Постулаты (положения) квантовой механики, на которые мы будем в дальнейшем опираться (для одной нерелятивистской безспиновой частицы):

1. Состояние частицы задаётся с помощью волновой функции  $\Psi(r, t)$

$\rho(r, t) = |\Psi|^2$  - плотность вероятности

а)  $\Psi(r, t)$  - является непрерывной; и, с оговорками, непрерывно дифференцируемой функцией.

Условие нормировки:  $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 d^3r = 1$

Волновая функция - элемент Гильбертова пространства. Скалярное произведение задаётся  $\langle \Psi | \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \varphi d^3r$  (Эти обозначения называются скобками Дирака). В

таких обозначения условие нормировки выглядит таким образом:  $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$

2.  $A(q, p) \longrightarrow \hat{A}(\hat{q}, \hat{p})$  (операторы)

а) Операторы линейные

б)  $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$  - эрмитовый. ( $\langle \varphi | \hat{A} | \Psi \rangle = ?$ )

3. Если измеряется величина  $A$  идеальным прибором, то мы получим элементы

$a_n: \hat{A} | U_n \rangle = a_n | U_n \rangle$  - задача на собственные значения.

а)  $a_n \in \mathbb{R}$

$$|\Psi\rangle = \sum_n \lambda_n |U_n\rangle \quad (26)$$

Квантовая механика говорит, что мы не можем точно определить результат измеряемой величины, мы можем только определить её вероятность.

$P(a_k) = |\lambda_k|^2$  - связывает состояние и физическую величину.

Домножим уравнение (26) слева скалярно на  $U_k$ , получим:

$$\langle U_k | \Psi \rangle = \langle U_k | \sum_n \lambda_n |U_n\rangle \quad (27)$$

Так как

$$\langle U_k | U_n \rangle = \delta_{kn} \quad (28)$$

То

$$\langle U_k | \Psi \rangle = \lambda_k \quad (29)$$

$$|\langle U_k | \Psi \rangle|^2 = \lambda_k^2 \quad (30)$$

4. Постулируется выражение для волновой функции:

$$\Psi(x, t) = C \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right) \quad (31)$$

$$E = \frac{p^2}{2m} \text{ и } \hbar\omega = \frac{\hbar^2\omega^2}{2m}$$

Продифференцировав по времени уравнение (31), получим:

$$\hbar\omega\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \quad (32)$$

Продифференцировав два раза по координате уравнение (31), получим:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \quad (33)$$

Уравнение (33) - имеет решением функцию  $\Psi$

Если частица несвободная, то:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + U(x, t)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \quad (34)$$

- это основное уравнение квантовой механики - нестационарное уравнение Шрёдингера.

Средний результат величины  $A$  в состоянии  $\Psi$ :

$$\langle \hat{A} \rangle_{\Psi} = \sum_n a_n \cdot |\lambda_n|^2 \quad (35)$$

Утверждаем, что:

$$\langle A \rangle_{\Psi} = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle = \sum_m \lambda_m^* \langle U_m | \hat{A} \sum_n \lambda_n | U_n \rangle = \sum_m \lambda_m^* \langle U_m | \sum_n \lambda_n a_n | U_n \rangle \quad (36)$$

А последнее выражение из-за ортонормированности:

$$\sum_m \lambda_m^* \langle U_m | \sum_n \lambda_n a_n | U_n \rangle = \sum_n a_n \cdot |\lambda_n|^2 \quad (37)$$

Дисперсия:

$$D_{\Psi}(A) = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \quad (38)$$

Можно строго математически ввести неопределённость:

$$D_{\Psi}(A) = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \quad (39)$$

$$\Delta_{\Psi}A = \sqrt{D_{\Psi}(A)} \quad (40)$$

Если  $|\Psi\rangle = |U_k\rangle$ , то  $D_{\Psi} = 0$

## 3.2 Операторы физических величин

### 3.2.1 Оператор координаты

$$\hat{x}$$

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x \cdot \rho(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x \cdot |\Psi|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* x \Psi dx \quad (41)$$

Приходим к результату:  $\hat{x} \rightarrow x$   
Собственные значения:  $(-\infty; +\infty)$

Собственные функции:  $\delta(x - \tilde{x})$

### 3.2.2 Оператор импульса

$$\hat{p}$$

$$\Psi_p = C \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right) \quad (42)$$

Но для таких функций не получается нормировка:  $\langle \Psi_p | \Psi_p \rangle = 1$  ??? Но это не катастрофа.

$$\langle \Psi_{p'} | \Psi_p \rangle = \delta(p - p') \quad (43)$$

Откуда получим, что  $C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$

$$|\Psi\rangle = \sum_p \lambda_p \Psi_p \sim \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda_p \cdot e^{\frac{i}{\hbar} px} dp \quad (44)$$

$$\lambda_p = \langle \Psi_p | \Psi \rangle \sim \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda_p e^{-\frac{i}{\hbar} px} dp \quad (45)$$

$$\langle p \rangle_\Psi = \sum_p p \cdot |\lambda_p|^2 \rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} p \cdot |\lambda_p|^2 dp = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda_p^* \lambda_p \cdot p \delta(p - p') dp dp' \quad (46)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \lambda_p^* \lambda_p \cdot p \delta(p - p') dp dp' = \int dx \int dp' \lambda_p^* \exp\left(-\frac{i}{\hbar} p' x\right) \int dp p \lambda_p \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right) = \langle \Psi | (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) | \Psi \rangle \quad (47)$$

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

Собственные значения:  $(-\infty; +\infty)$

Собственные функции:  $\exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right)$

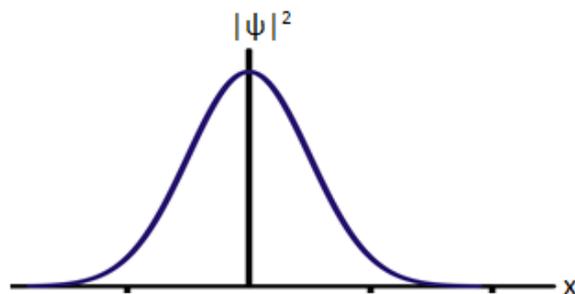


Рис. 15: Плотность вероятности

### 3.3 Пример волновой функции

Пример: Гауссов волновой пакет рис.16  
 $t=0$ :

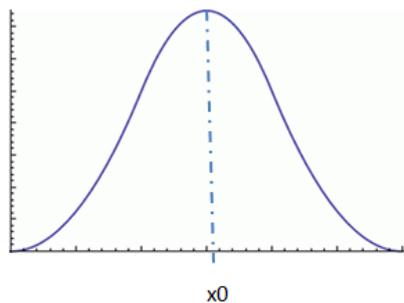


Рис. 16: Гауссова функция

$$\Psi(x, t) = e^{ik_0x} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \cdot \frac{(x - x_0)^2}{a^2}\right) \quad (48)$$

Тогда, проделав необходимые вычисления, получим:

$$\langle x \rangle_{\Psi} = x_0 \quad (49)$$

$$\langle p \rangle_{\Psi} = \hbar k_0 \quad (50)$$

$$D_{\Psi}(x) = ? \quad D_{\Psi}(p) = ?$$

## Лекция 4

### 4 Основные понятия квантовой механики

#### 4.1 Коммутаторы

В теоретической механике вводились понятия обобщённых координат.

$$\{Q_k; P_k\} = \{q_k; p_k\} \quad (51)$$

$q$  и  $p$  - это координата и импульс.

$Q$  и  $P$  - это новые динамические переменные.

Скобки Пуассона из двух произвольных динамических переменных в классической механике для двух функций координат и импульса - это есть сумма по всем возможным номерам переменных:

$$\sum \left( \frac{\partial Q}{\partial p_k} \cdot \frac{\partial P}{\partial q_k} - \frac{\partial Q}{\partial q_k} \cdot \frac{\partial P}{\partial p_k} \right) \quad (52)$$

Новыми хорошими обобщёнными координатами и импульсами будут только те динамические переменные, которые сохраняют вид скобок Пуассона характерный для обычной координаты и импульса в теоретической механике.

$$\{Q_k; P_k\} = \{q_k; p_k\} = C \cdot \delta_{k;k'} \quad (53)$$

Чтобы новые обобщённые координаты сохраняли вид уравнения необходимо, чтобы они давали аналогичный вид для скобок Пуассона.

Есть аналог скобок Пуассона - коммутаторы.

$$[\hat{Q}; \hat{P}] = \hat{Q}\hat{P} - \hat{P}\hat{Q} \quad (54)$$

Два оператора коммутируют, если их коммутатор равен нулю.

$$[\hat{p}_x; \hat{x}]\Psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(x\Psi) - x(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x})\Psi = -i\hbar\Psi \quad (55)$$

Скобка Пуассона - это константа, коммутатор - это скобка Пуассона с точностью до  $\frac{i}{\hbar}$ .

Скобка Пуассона позволяет вычислять полные производные по времени от динамических переменных и выявлять интегралы движения (сохраняющиеся величины).

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \{F; H\} \quad (56)$$

$$\frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \{\hat{F}; \hat{H}\} \cdot \frac{i}{\hbar} \quad (57)$$

$$\left\langle \frac{d\hat{F}}{dt} \right\rangle_{\Psi} = \left\langle \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \right\rangle_{\Psi} + \left\langle \{\hat{F}; \hat{H}\} \right\rangle_{\Psi} \cdot \frac{i}{\hbar} \quad (58)$$

Теорема Эренфеста:

Для произвольного  $\Psi$ :

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{p}_x \rangle = - \langle \frac{\partial U(x)}{\partial x} \rangle_{\Psi} \quad (59)$$

где  $U(x)$  - это потенциальная энергия.

Есть математическая теорема:

Для любых линейных, эрмитовых операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  и для любого  $\Psi$ , для которых выполнено условие (60):

$$[\hat{A}; \hat{B}] = iC \quad (60)$$

следует условие (61):

$$\sqrt{D_{\Psi(A)}} \cdot \sqrt{D_{\Psi(B)}} \geq \frac{C^2}{4} \quad (61)$$

То есть мы не можем одновременно точно измерить эти величины в одном состоянии.

Если же две величины коммутируют, то в принципе можно.

Пример:

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

$[\hat{p}_y; \hat{x}] = 0$  - можем точно измерить одновременно.

## 4.2 Оператор момента количества движения

Оператор момента количества движения  $\hat{L}$

$$\hat{L} = [\hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}] = \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ x & y & z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix} \cdot (-i\hbar) \quad (62)$$

$$\hat{L}_z = (-i\hbar)(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}) \quad (63)$$

$$\hat{L}_j = \varepsilon_{jkl} \cdot \hat{q}_k \hat{p}_l \quad (64)$$

где  $\varepsilon_{jkl}$  - абсолютно антисимметричный тензор Леви-Чевиты

$j, k, l \rightarrow x, y, z \rightarrow 1$ . Далее, если происходит одна циклическая перестановка, то -1, и так далее. При каждой циклической перестановке меняется знак.

Если происходит повтор индекса, например,  $x, x, z \rightarrow 0$ .

Также в записи (64) применяется правило Эйнштейна: по повторяющимся индексам происходит суммирование.

Но нам удобнее рассматривать объекты в сферической системе координат:

$$x = r \cdot \sin\theta \cos\varphi \quad (65)$$

$$y = r \cdot \sin\theta \sin\varphi \quad (66)$$

$$z = r \cdot \cos\theta \quad (67)$$

Вспоминая математический анализ:

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} = \frac{\partial x}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \quad (68)$$

Из (65), получаем  $\frac{\partial x}{\partial \varphi} = -y$ ;

Из (66), получаем  $\frac{\partial y}{\partial \varphi} = x$ ;

Из (67), получаем  $\frac{\partial z}{\partial \varphi} = 0$ .

Тогда из (63) и (68):

$$\widehat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (69)$$

Рассмотрим задачу на собственные значения и собственные функции оператора  $\widehat{L}_z$ :

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi(\varphi)}{\partial \varphi} = L_z \Psi(\varphi) \quad (70)$$

Получим:

$$\Psi(\varphi) = C \cdot \exp(i\hbar L_z \varphi) \quad (71)$$

Требование:  $\Psi(\varphi+2\pi) = \Psi(\varphi)$  - одна и та же вероятность найти одну и ту же частицу в одной и той же точки пространства (следует из первого положения квантовой механики).

$$\Psi(\varphi) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \cdot 2\pi L_z\right) = \Psi(\varphi) \quad (72)$$

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar} \cdot 2\pi L_z\right) = 1 \quad (73)$$

Получим:  $L_z = m\hbar$ , где  $m \in \mathbb{Z}$

$[\widehat{L}_z; \widehat{\varphi}] = i\hbar$  - то есть для данных величин действует соотношение неопределённости.

### 4.3 Оператор Гамильтона

Функция Гамильтона:

$$H = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}, t) \quad (74)$$

Переходим к квантовой механике:

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{p}^2}{2m} + \widehat{U}(\vec{r}, t) \quad (75)$$

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U(\vec{r}, t) \quad (76)$$

### 4.3.1 Стационарное уравнение Шрёдингера, где $U$ - не зависит от времени

То есть,  $U(\vec{r}, t) = U(\vec{r})$ .

В одномерном пространстве (1D):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + U(x, t) \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (77)$$

Будем искать решение в виде:  $\Psi(x, t) = f(t) \cdot \tilde{\Psi}(x)$

$$i\hbar \cdot \tilde{\Psi} \cdot \dot{f} = -\frac{\hbar^2}{2m} \tilde{\Psi}'' f + U(x) \tilde{\Psi} f \quad (78)$$

Разделим уравнение (78) на  $\tilde{\Psi} f$ , получим:

$$i\hbar \cdot \frac{\dot{f}}{f} = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\tilde{\Psi}''}{\tilde{\Psi}} + U(x) \quad (79)$$

Левая часть уравнения (79) зависит только от времени, правая же часть только от координаты. Равенство должно выполняться при любом  $t$  и любом  $x$ . Значит, левая и правая части должны равняться константе, обозначим её  $E$ .

Тогда из равенства константе левой части:

$$\dot{f} - \frac{fE}{i\hbar} = 0 \quad (80)$$

$$f = C \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et\right) \quad (81)$$

Для правой части:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \tilde{\Psi}'' + U(x) \tilde{\Psi} = E \tilde{\Psi} \quad (82)$$

$\hat{H} \tilde{\Psi}(x) = E \tilde{\Psi}(x)$  - задача на собственные значения и собственные функции оператора  $\hat{H}$ .

Пусть рассматривается случай с дискретным спектром оператора Гамильтона:

$$\hat{H} \tilde{\Psi}_n(x) = E_n \tilde{\Psi}_n(x) \quad (83)$$

Тогда координатная часть должна удовлетворять стационарному уравнению Шрёдингера.

Произвольная волновая функция:

$$\Psi(x, t) = \sum_n \lambda_n \tilde{\Psi}_n \cdot \exp\left(\frac{-i}{\hbar} E_n t\right) + \int \lambda_E \tilde{\Psi}_E \cdot \exp\left(\frac{-i}{\hbar} E t\right) \quad (84)$$

Популярный вопрос на экзамене: зависит ли стационарное состояние от времени? Правильный ответ - да. (в формуле есть зависимость от времени). Но  $\rho_{E_n} = |\tilde{\Psi}_n(x)|^2$  - не зависит от времени  $t$ .

### 4.3.2 Абсолютно свободная частица движется в пространстве, где $U(x)=0$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \quad (85)$$

В одномерном случае:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi'' = E\Psi \quad (86)$$

Тогда получим уравнение:

$$\Psi'' + k^2 \Psi = 0 \quad (87)$$

где  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

Размерность  $k$  - это  $\text{см}^{-1}$ , похоже на волновое число.

Заметим, что у нас нет требования на отрицательность  $E$ .

Если  $E > 0$ , то  $\Psi \sim \exp(\lambda x)$

$$\lambda^2 + k^2 = 0 \quad (88)$$

$$\lambda_{1,2} = \pm \frac{i\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (89)$$

$$\Psi = A \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar}\sqrt{2mE} \cdot x\right) + B \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\sqrt{2mE} \cdot x\right) \quad (90)$$

Если  $E < 0 \Rightarrow$

$$\lambda_{1,2} = \pm \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} \quad (91)$$

$$\Psi = A \cdot \exp\left(\frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} \cdot x\right) + B \cdot \exp\left(-\frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} \cdot x\right) \quad (92)$$

Из основного положения 1 квантовой механики:  $|\Psi|^2 \rightarrow \infty$ . Но если  $x \rightarrow +\infty$ , то тогда  $A=0$

Если  $x \rightarrow -\infty$ , то  $B=0$

То есть нет никаких частиц, у которых кинетическая энергия была бы отрицательной.

### 4.3.3 Собственные функции и собственные значения оператора Гамильтона

Для оператора Гамильтона:

Собственные значения: все  $E > 0$

Собственные функции:  $\Psi = A \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar}\sqrt{2mE} \cdot x\right) + B \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\sqrt{2mE} \cdot x\right)$

Какие же значения может принимать импульс?

$$U_p = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar}px\right) \quad (93)$$

Выражение (93) - собственные функции оператора импульса.

$$\Psi_{(E)} = A \cdot U_{p=+\sqrt{2mE}} + B \cdot U_{p=-\sqrt{2mE}} \quad (94)$$

Вспомним основное положение 3 квантовой механики:  $\Psi$  раскладывается по ортонормированному базису другого оператора, значит:

вероятность  $P = |A|^2 \rightarrow +\sqrt{2mE}$

$P = |B|^2 \rightarrow + - \sqrt{2mE}$

$|A|^2 + |B|^2 = 1$  - условие нормировки.

То есть получаем два возможных значения импульса.

Если  $|A| = |B| = \frac{1}{\sqrt{2}}$ , то  $\langle p \rangle_{\Psi_E} = 0$

## Лекция 5

### 5 Потенциальная яма и гармонический осциллятор

#### 5.1 Финитное движение электрона

Перейдём к рассмотрению финитного движения, так как электрон в атоме совершает ограниченное движение.

Бесконечно глубокий потенциальный ящик рис.(17):

$$U(x) = \begin{cases} 0, & |x| \leq \frac{a}{2} \\ \infty, & |x| > \frac{a}{2} \end{cases} \quad (95)$$

Рассматриваем одномерный случай:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (96)$$

Если  $E < 0 \Rightarrow \Psi \equiv 0$  ( см. предыдущую лекцию)

$\Psi(x) \equiv 0$ , если  $|x| > \frac{a}{2}$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad E > 0 \quad (97)$$

$$\Psi'' + k^2\Psi = 0 \quad (98)$$

$$\Psi(x) = A \cdot \sin(kx) + B \cdot \cos(kx) \quad (99)$$

Волновая функция непрерывна (см. 1 положение)

$$\begin{cases} \Psi\left(\frac{a}{2}\right) = A \cdot \sin\left(\frac{ka}{2}\right) + B \cdot \cos\left(\frac{ka}{2}\right) = 0, \\ \Psi\left(-\frac{a}{2}\right) = -A \cdot \sin\left(\frac{ka}{2}\right) + B \cdot \cos\left(\frac{ka}{2}\right) = 0; \end{cases} \quad (100)$$

Система (100) разрешима, если  $\det(\text{СЛАУ})=0$

Значит,  $\sin(ka) = 0$

$$k_n a = \pi n \quad (101)$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2} \quad (102)$$

Сделаем важный вывод: перешли к финитному движению - появился дискретный спектр разрешённых значений энергий.

Большой кусок металла можно описать как яму очень большой, но конечной глубины, и для него можно пользоваться выражением для  $E_n$ . Но существует принцип Паули: один уровень могут занимать 2 электрона. Электронов в металле много, но и уровней энергии тоже.

$E_F$ - уровень энергии, до которого уровни заполнены, а уровни над - свободные.

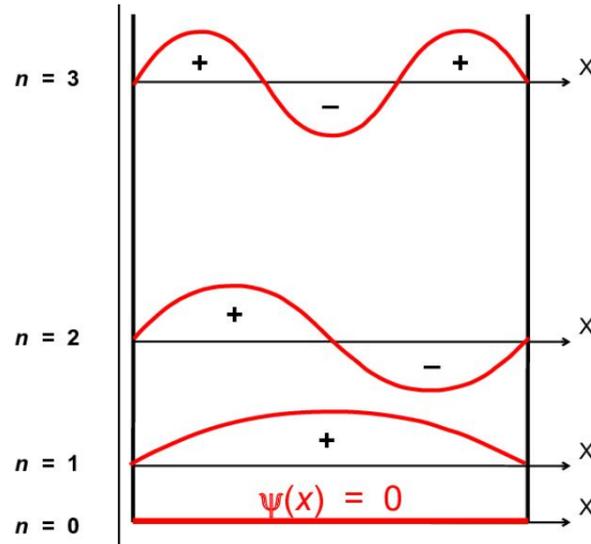


Рис. 17: Бесконечная потенциальная яма

Разница между глубиной ямы и  $E_F$  - это работа выхода.

$A_B = U - E_F$  - минимальная работа, чтобы электрон перешёл в свободное движение.

Из системы (100) следует:

$$A \cdot \sin(k_n \frac{a}{2}) = \pm B \cdot \cos(k_n \frac{a}{2}) \quad (103)$$

$$\frac{B}{A} = \pm \operatorname{tg}(\frac{k_n a}{2}) = \begin{cases} 0, \Rightarrow B_n = 0 \\ \infty, \Rightarrow A_n = 0 \end{cases} \quad (104)$$

Введём оператор чётности P:

$$P\Psi(x) = \Psi(-x) \quad (105)$$

## 5.2 Яма с барьером

На рис. (18) изображена картина потенциала.

Если высота барьера  $V_0 = \infty$ , то получаются две несвязанные бесконечные ямы (меняется только ширина у ямы).

Слева волновая функция  $\Psi_L$ , справа  $\Psi_R$

$\Psi_L$  и  $\Psi_R \neq$  С.Ф. оператора  $\hat{H}_2$ , так как они не обладают чётностью.

$$\Psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \Psi_L \pm \Psi_R \} \quad (106)$$

Если  $V_0 \neq \infty \neq 0$  - конечный, то

$$E_{\pm} = E_1 \mp \delta E \quad (107)$$

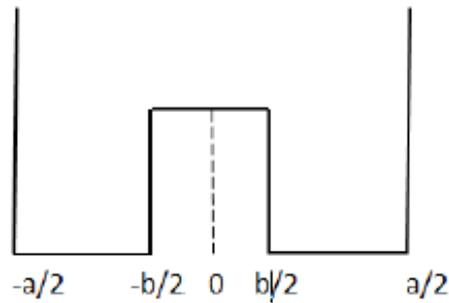


Рис. 18: Яма с барьером

$$\delta E \sim \exp\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\right) \quad (108)$$

- величина расщепления;

Сшиваем по непрерывности нашу функцию в точках  $(\frac{a}{2})$ ,  $(-\frac{a}{2})$ ;  $(-\frac{b}{2})$ ,  $(\frac{b}{2})$ ; и по непрерывности производных  $(-\frac{b}{2})$ ,  $(\frac{b}{2})$ .

Перейдём в модель твёрдого тела (обладает кристаллической структурой). Возникает периодический барьер (потенциал).  $N$  - это число ионов в решётке и  $N$  - это кратность вырождения основного или, например, 1-го возбужденного состояния в системе.

Если в системе  $N$  ям, то произойдёт расщепление 1-го уровня на  $N$  новых. Таким образом, мы пришли к зонной теории в проводниках.

### 5.3 Одномерный гармонический осциллятор

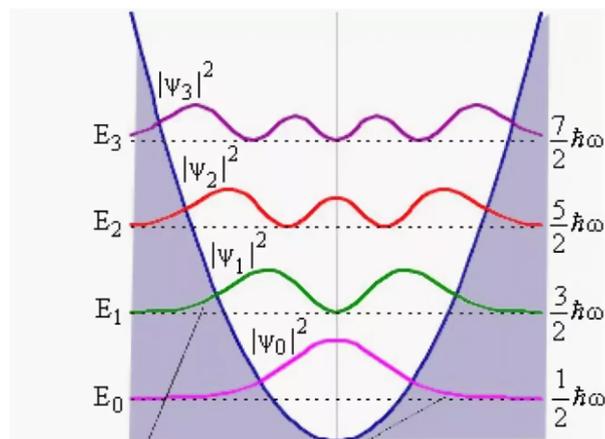


Рис. 19: Гармонический потенциал

$$U(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (109)$$

### 5.3.1 Осцилляторная теорема

Осцилляторная теорема:

Если  $U(x)=U(-x)$  и эта функция не обладает бесконечно большим количеством устранимых разрывов, то для финитного движения:

- 1)  $\Psi(x) \Rightarrow$  чётная или нечётная функция
- 2)  $\Psi_n - C \cdot (n-1)!, \dots$

Собственные функции и собственные значения:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi'' + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \Psi = E\Psi \quad | \cdot \frac{2}{\hbar\omega} \quad (110)$$

$$-\frac{\hbar}{m\omega}\Psi'' + \frac{m\omega}{\hbar}x^2 \Psi = \frac{2E}{\hbar\omega}\Psi \quad (111)$$

Пусть  $\frac{\hbar}{m\omega} = x_0^2; \varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}; \xi = \frac{x}{x_0}$

$$-\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} + \xi^2\Psi = \varepsilon\Psi \quad (112)$$

Исследуем на асимптотическое решение:

$$\Psi_{as} \sim \exp(\alpha\xi^2) \quad (113)$$

- проверим, удовлетворяет ли данное решение уравнению (112), где  $\alpha < 0$

$$\Psi'_{as} = 2\alpha\xi\Psi_{as} \quad (114)$$

$$\Psi''_{as} = 2\alpha\Psi_{as} + 4\alpha^2\xi^2\Psi_{as} \quad (115)$$

Подставляем в (112), получим:

$$(1 - 4\alpha^2)\xi^2 - 2\alpha = \varepsilon \quad (116)$$

Это равенство должно выполняться для любого  $\xi$ , значит, так как  $\varepsilon = const$  и  $\alpha = const$ , то  $1 - 4\alpha^2 = 0$ ;

$\alpha = \pm \frac{1}{2}$ , но так как  $\alpha < 0$ , то  $\alpha = -\frac{1}{2}$

$$\Psi_{as} \sim \exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right) \quad (117)$$

И, так как  $\alpha = -\frac{1}{2} \Rightarrow \varepsilon = 1 \Rightarrow E_{as} = \frac{\hbar\omega}{2}$

Полное решение:

Воспользуемся осцилляторной теоремой:

$$\Psi_n = P_n(\xi) \cdot \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \quad (118)$$

где  $P_n(\xi)$  - это полином n-степени

$$\Psi'_n = P'_n \cdot \exp(-\frac{\xi^2}{2}) + P_n \cdot (-\xi) \exp(-\frac{\xi^2}{2}) \quad (119)$$

$$\Psi''_n = P''_n \cdot \exp(-\frac{\xi^2}{2}) - 2P'_n \xi \exp(-\frac{\xi^2}{2}) + P_n \exp(-\frac{\xi^2}{2})(\xi^2 - 1) \quad (120)$$

Подставляем  $\Psi_n$  в исходное уравнение:

$$-P''_n + 2\xi P'_n + P_n = \varepsilon P_n \quad (121)$$

$$P = a_0 \cdot \xi^0 + a_1 \xi^1 + \dots$$

Многочлены равны, если равны их коэффициенты, тогда получаем:

$$2n \cdot a_n + a_n = \varepsilon \quad (122)$$

$$\varepsilon_n = 2n + 1 \Rightarrow E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \quad (123)$$

$$-P''_n + 2\xi P'_n = 2nP_n \quad (124)$$

- это уравнение для полиномов Эрмита (из курса ММФ)

$$\Rightarrow \xi \mathbb{H}_n = \mathbb{H}_{n-1} \cdot n + \frac{1}{2} \mathbb{H}_{n+1} \quad (125)$$

$$\mathbb{H}_0 = 1$$

$$\mathbb{H}_1 = 2\xi$$

$$\langle x \rangle_{n=12} = \int_{-\infty}^{+\infty} x \Psi_n^* \Psi_n dx = 0 \quad (126)$$

x-нечётная функция, а  $\Psi_n^* \Psi_n = \mathbb{C}$ , тогда  $\mathbb{H} \cdot \mathbb{C} = \mathbb{H}$

Что же осциллирует в гармоническом осцилляторе?

## 5.4 Примеры

Пример 1:

В момент времени  $t=0$ :

$$\Psi = \alpha \Psi_0 + \beta \Psi_1 \quad (127)$$

$$\Psi(x, t) = \alpha \Psi_0(x) \exp(i\frac{\hbar\omega}{2\hbar}t) + \beta \Psi_1 \exp(i\frac{3\hbar\omega}{2\hbar}t) \quad (128)$$

$$\rho(x, t) = \Psi^* \Psi = |\alpha|^2 \Psi_0^2 + |\beta|^2 \Psi_1^2 + \Psi_0 \Psi_1 \alpha \beta^* \exp(i(-\frac{2\omega}{2})t) + \alpha^* \beta \exp(i\omega t) \Psi_0 \Psi_1 \quad (129)$$

Пусть  $\alpha$  и  $\beta$  - действительные, тогда получаем член  $2\alpha\beta \cos(\omega t)$

$$\rho(x, t) = |\alpha|^2 \Psi_0^2 + |\beta|^2 \Psi_1^2 + 2\Psi_0 \Psi_1 \alpha \beta \cos(\omega t) \quad (130)$$

Стационарное состояние - состояние, в котором точно определена энергия.

В этом нестационарном:  $P = |\alpha|^2 \rightarrow E = \frac{\hbar\omega}{2}$

$P = |\beta|^2 \rightarrow E = \frac{3\hbar\omega}{2}$

В таких состояниях происходит осцилляция вероятности с частотой  $\omega$

$$\langle x \rangle_{\Psi} = \langle x \rangle_0 |\alpha|^2 + \langle x \rangle_1 |\beta|^2 + 2\alpha\beta \cos(\omega t) \cdot \langle \Psi_0 | \hat{x} | \Psi_1 \rangle \quad (131)$$

$$\langle \Psi_0 | \hat{x} | \Psi_1 \rangle = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \quad (132)$$

$$\langle x \rangle_{\Psi} = 2\alpha\beta \cos(\omega t) \cdot \frac{x_0}{\sqrt{2}} \quad (133)$$

Пример 2:

$$\Psi = \alpha\Psi_0 + \beta\Psi_2 \quad (134)$$

Аналогично, как и в примере 1:

$$\rho(x, t) = |\alpha|^2\Psi_0^2 + |\beta|^2\Psi_2^2 + 2\Psi_0\Psi_2\alpha\beta\cos(2\omega t) \quad (135)$$

$$\langle x \rangle_{\Psi} = \langle x \rangle_0 |\alpha|^2 + \langle x \rangle_2 |\beta|^2 + 2\alpha\beta \cos(2\omega t) \cdot \langle \Psi_0 | \hat{x} | \Psi_2 \rangle \quad (136)$$

Но

$$\langle \Psi_0 | \hat{x} | \Psi_2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_0 x \Psi_2 dx = 0 \quad (137)$$

Значит:

$$\langle x \rangle_{\Psi} = 0 \quad (138)$$

## Лекция 6

### 6 Потенциальный барьер

#### 6.1 Поток плотности вероятности

Закон сохранения вещества представляется в виде уравнения непрерывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \vec{j} = 0 \quad (139)$$

где  $\vec{j}$  - поток плотности вероятности

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U\Psi \quad (*) \quad (140)$$

Но договоримся, что  $U = U^*$ , получим:

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi^* + U\Psi^* \quad (141)$$

Проделаем следующее:  $\Psi^* \cdot (140) - \Psi \cdot (141)$ , получим:

$$i\hbar \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} (\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^*) \quad (142)$$

$\rho = \Psi^* \Psi$ , тогда

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) \quad (143)$$

Так как  $\nabla \Psi^* \nabla \Psi = \nabla \Psi \nabla \Psi^*$ , то

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^*) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \quad (144)$$

тогда:

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\text{div } \vec{j} \quad (145)$$

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} \cdot (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \quad (146)$$

Пример:

$$\Psi \sim A \cdot \exp(ikx) \quad (147)$$

где  $k$  - волновое число.

Можно посчитать по формуле (146)

$$\vec{j}_\Psi \sim |A|^2 \frac{\vec{k}}{m} \quad (148)$$

Если частица с точно определённым импульсом  $\hbar \vec{k}$ , то ему соответствует "+" поток вероятности.

## 6.2 Потенциальные барьеры

### 6.2.1 Потенциальный барьер ступенька

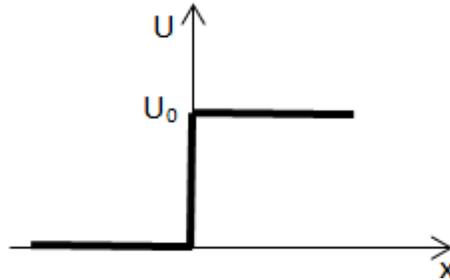


Рис. 20: Барьер ступенька

Алгоритм решения задачи при прохождении волны через неоднородную среду:  
 Рассмотрим задачу с потенциальным барьером "ступенька" рис.(20)

$$а) E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} > U_0$$

Шаг 1: Записываем стационарное уравнение Шрёдингера в разных областях пространства:

В области I:

$$\Psi_I = A_1 \cdot \exp(ik_1x) + B_1 \cdot \exp(-ik_1x) \quad (149)$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (150)$$

В области II:

$$\Psi_{II} = A_2 \cdot \exp(ik_2x) + B_2 \cdot \exp(-ik_2x) \quad (151)$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar} \quad (152)$$

Шаг 2: Сшиваем функции:

$$\Psi_I|_{x=0} = \Psi_{II}|_{x=0} \quad (153)$$

В области I существует только 2 волны: падающая и отражённая.

В области II нет никаких физических причин существования потока справа налево, значит,  $B_2 = 0$  (сопоставление состояния с точно определённым импульсом с состояниями с положительным или отрицательным потоком, позволяет выделить потоки падающие, прошедшие и отражённые).

$$\Psi'_I|_{x=0} = \Psi'_{II}|_{x=0} \quad (154)$$

Условие (154) выполняется, так как функция терпит не разрыв II рода. Также необходимо соблюсти начальные условия:  $A = 1$ , либо нормируем все последующие величины на  $A$ .

$$R = \frac{j_{otr}}{j_{pad}} = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} \quad (155)$$

-коэффициент отражения.

$$D = \frac{j_{pr}}{j_{pad}} = \frac{|A_2|^2 \cdot k_2}{|A_1|^2 \cdot k_1} \quad (156)$$

-коэффициент прохождения.

Данные значения коэффициентов следуют из формулы (148). Можно себя проверить:

$$R + D = 1 \quad (157)$$

б)  $E < U_0$

С классической точки зрения точка  $x=0$  - это точка поворота. В курсе электромагнетизма рассматривалось падение электромагнитной волны на поверхность металла. Получался скин-эффект.

В области I решение не меняется, такое же как в пункте а)

В области II:

$$\Psi_{II} = A_2 \cdot \exp(k_2 x) + B_2 \cdot \exp(-k_2 x) \quad (158)$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m|E - U_0|}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} \quad (159)$$

$A_2 = 0$  - по 1 положению квантовой механики

В этом случае  $R = 1, D = 0$

Но происходит парадокс: в области II волновая функция не равна нулю, значит есть вероятность наблюдения волны, но тогда неравенство  $E < U_0$  непонятно. Объяснение этому - это соотношение неопределённостей (неопределённость в энергии).

### 6.2.2 Потенциальный барьер конечной ширины

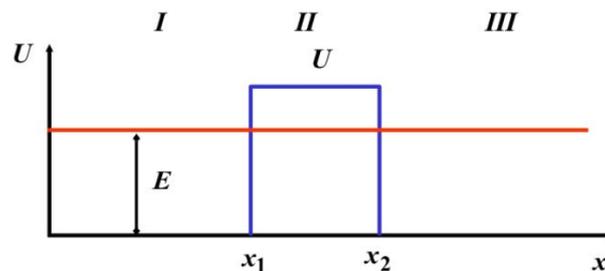


Рис. 21: Барьер конечной ширины

Если мы попробуем изобразить волновую функцию, то возникает вопрос: как это сделать в области III?  $B_3 = 0$ , значит, в этой области остаётся только комплексная

экспонента, рисовать которую мы не умеем.

В данном примере нельзя выкидывать  $A_2$ , но им можно пренебречь.

Нахождение коэффициентов прохождения решается сшиванием волновых функций и другими методами, как в предыдущих примерах. Оценочно, получим:

$$D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} \sim \exp(-2k_2b) \quad (160)$$

### 6.2.3 Барьер сложной формы

Рассмотрим туннелирование ( $E < U_0$ ) через барьер на рис.(22)

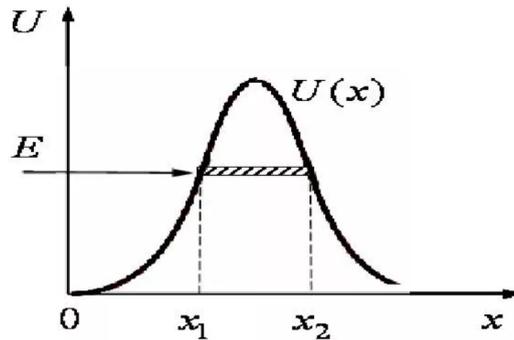


Рис. 22: Барьер сложной формы

Вероятность прохождения через два подряд идущих барьера конечной ширины  $P = P_1 \cdot P_2$ . Тогда разобьём наш барьер сложной формы на прямоугольники (также, как и при интегрировании), и оценочно:

$$D \sim \exp\left(-\int_{x_1}^{x_2} \frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} dx\right) \quad (161)$$

Эффективная ширина барьера - ширина области классически запрещённой.

## 6.3 Квазиклассическое приближение

Квазиклассическое приближение - приближение Вентцеля-Крамерса Бриллюэна (ВКБ).

Теорема Эренфеста

$$\frac{d \langle p \rangle_\Psi}{dt} = - \left\langle \frac{\partial U}{\partial x} \right\rangle_\Psi = \langle F \rangle_\Psi \quad (162)$$

Замечание 1: Частица, которая описывается через комплексные экспоненты  $\exp(ikx)$  - не локализована.

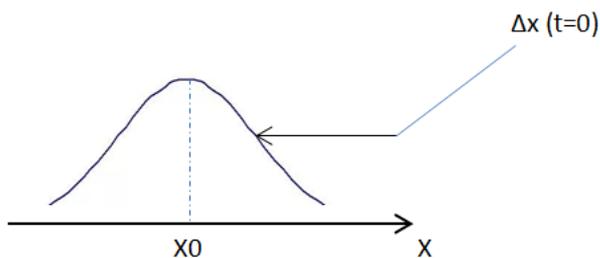


Рис. 23: Волновой пакет при  $t=0$

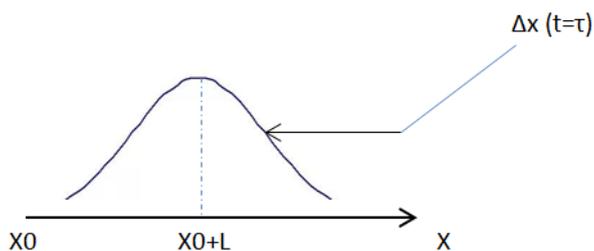


Рис. 24: Волновой пакет при  $t = \tau$

Волновой пакет - суперпозиция плоских волн (рис. (23) и рис. (24))

Вроде бы схоже с движением с классической точки зрения, но есть нюанс: чем микроскопичней частица в  $x$ -пространстве, тем шире пакет в  $k$ -пространстве. То есть разные части волнового пакета движутся с разной скоростью.

$(\Delta x)_\tau \ll L$  - классические аналогии в квантовом движении.

Чтобы говорить о таких понятиях 'частица налетает', 'частица отражается', необходимо, чтобы микроскопические частицы обладали большой скоростью.

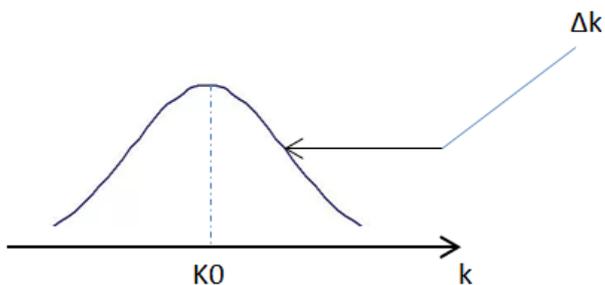


Рис. 25: Волновые векторы

Замечание 2:

$$\langle F(x) \rangle_\Psi \neq F(\langle x \rangle_\Psi) \quad (163)$$

Но теоремой Эренфеста можно пользоваться для квантовой системы, когда

$$|\nabla U(x)| \leq \frac{|\Delta U|}{\Delta x}$$

## 6.4 Эффективный импульс

Рассмотрим стационарное уравнение Шрёдингера:

$$-\hbar^2 \Psi''(x) = 2m(E - U(x))\Psi(x) = p^2(x)\Psi(x) \quad (164)$$

где  $p(x)$  - эффективный импульс.

Рассмотрим барьер сложной формы на рис.(26).

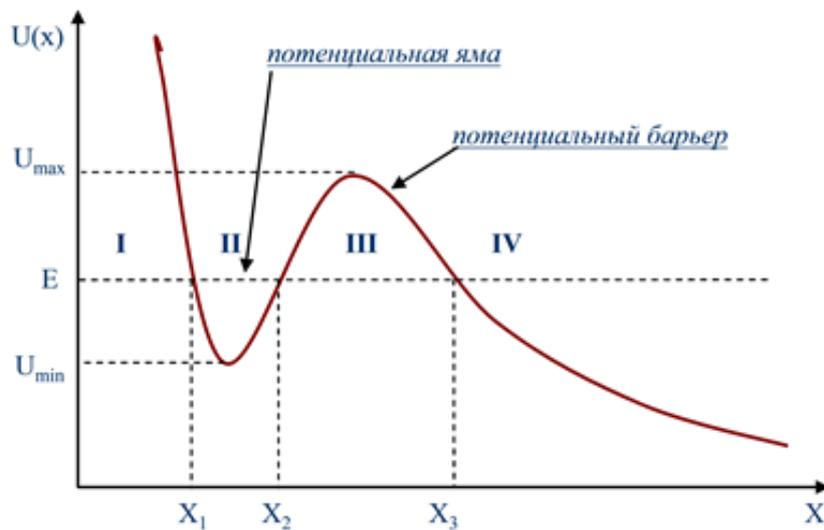


Рис. 26: Барьер сложной формы

Будем искать решение в виде:

$$\Psi \sim \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(x)\right) \quad (165)$$

где  $S(x)$ -некоторая функция.

$$\Psi' = S' \left(\frac{i}{\hbar} \Psi\right) \quad (166)$$

$$\Psi'' = \frac{i}{\hbar} S'' \Psi + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 (S')^2 \Psi \quad (167)$$

Тогда после подстановки:

$$-i\hbar S'' \Psi + S'^2 \Psi = p^2 \Psi \quad (168)$$

$\hbar \rightarrow 0$

$$S'^2 \Psi = p^2 \Psi \quad (169)$$

$$\Psi \sim \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx\right) \quad (170)$$

Рассмотрим другой подход решения уравнения (168)

Пусть  $S(x) = S_0(x) + \hbar S_1(x) + \hbar^2 S_2(x) + \dots$  - разложение по малому параметру.

Если оставить только члены первой малости, то есть  $S(x) = S_0(x) + \hbar S_1(x)$ , то получим решение

$$\Psi^{(1\hbar)} \sim \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx\right) \quad (171)$$

$x_1, x_2, x_3$ - точки поворота. Они являются функциями от  $E$ , но  $E = \text{const}$ .

II область - область финитного движения.

I и III - область запрещённого движения.

IV - область почти свободной частицы.

Рассмотрим точку  $x_2$ :

Пользуемся квазиклассическим приближением:

В области III:

$$\Psi = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \cdot \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x p(x) dx\right) \quad (172)$$

В области II:

$$\frac{C_1}{\sqrt{p}} \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int p dx\right) + \frac{C_2}{\sqrt{p}} \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int p dx\right) = \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int p dx + \theta\right) \quad (173)$$

Плохо то, что в знаменателе под корнем стоит  $p(x)$ :

$$p(x) = 2m(E - U(x)) \quad (174)$$

а в точке  $x_2$ :  $E = U(x)$ . Катастрофа.

Ширина на уровне  $E_n$  рис.(27)

$$L(E_n) = n \frac{\lambda_D}{2} \quad (175)$$

-разрешённые в обл II

## 6.5 Квазистационарные состояния

Рассмотрим частицу на разрешённом уровне  $E_n$ . Частица хочет протуннелировать, значит, появляется время жизни у частицы, период полураспада. Откуда? Если решим данную задачу, то получим:

$$E_n = E_n^0 + i j_n \quad (176)$$

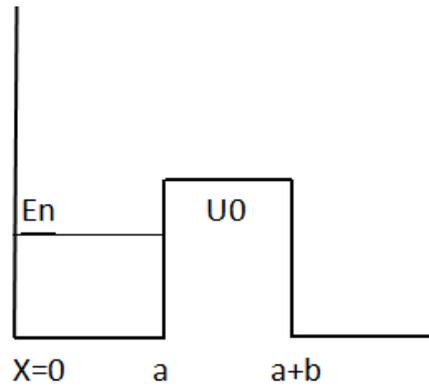


Рис. 27: Яма + барьер

- комплексная энергия

$$|\Psi|^2 = \exp(i\frac{E_n}{\hbar}t) \cdot \exp(-i\frac{E_n}{\hbar}t) \quad (177)$$

,но у  $E_n$  есть комплексная часть.

$$|\Psi|^2 = \exp(-2jt) \quad (178)$$

- это и есть распад.

Такие состояния называются квазистационарными.

## Лекция 7

### 7 Движение в центрально-симметричном поле

#### 7.1 Оператор Гамильтона в центрально-симметричном поле

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (179)$$

Будем искать решения данного уравнения уже в трёхмерном случае:  
Рассмотрим задачу Кеплера. Будем работать в сферической системе координат.  
 $U(\vec{r}) = U(r)$  - центральная симметрия.

##### 7.1.1 Интегралы движения в центрально-симметричном поле

Оператор Гамильтона:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r) \quad (180)$$

$$\nabla^2 = \nabla_r^2 + \frac{1}{r^2} \nabla_{\theta,\varphi}^2 \quad (181)$$

$$\nabla_r^2 = \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \cdot (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) \quad (182)$$

$$\nabla_r^2 = \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial^2}{\partial r^2} \cdot r = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \quad (183)$$

$$\nabla_{\theta,\varphi}^2 = \frac{1}{\sin\theta} \cdot \frac{\partial}{\partial\theta} (\sin\theta \cdot \frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \quad (184)$$

$$T = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} \quad (185)$$

где  $L$  - момент количества движения.

Из второго положения квантовой механики:

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} \quad (186)$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \nabla_{\theta,\varphi}^2 \quad (187)$$

Посмотрим на (180):  $\hat{L}^2$  - не зависит от  $r$ ,  $\hat{H}$  - зависит от  $r, \theta, \varphi$ , но вся зависимость от  $\theta, \varphi$  сосредоточена в  $\hat{L}^2$ . Значит нет разницы:

$$\hat{H}\hat{L}^2\Psi = \hat{L}^2\hat{H}\Psi \quad (188)$$

$\hat{H}\hat{L}^2$  - коммутируют, то есть:

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = 0 \quad (189)$$

$\hat{L}^2$  - интеграл движения. У  $\hat{H}$  и  $\hat{L}^2$  есть общие собственные функции, также в таких состояниях можно точно одновременно измерить  $E$  и  $L^2$ .

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi} \quad (190)$$

$$\hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (191)$$

В оператор  $\hat{L}^2$  зависимость от  $\varphi$  входит через  $\hat{L}_z$ .

Нет разницы:  $\hat{L}^2 \hat{L}_z \Psi = \hat{L}_z \hat{L}^2 \Psi$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0 \quad (192)$$

Тогда и

$$[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0 \quad (193)$$

Получается, что в стационарном состоянии в произвольном сферически симметричном потенциале точно определены  $E$ ,  $L$  и  $L_z$

### 7.1.2 Разделение переменных

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot Y(\theta, \varphi) \quad (194)$$

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad | \cdot \frac{-\frac{2m}{\hbar^2}r^2}{RY} \quad (195)$$

$$\frac{r^2 \nabla_r^2 R}{R} + \frac{2mr^2}{\hbar^2} (E - U(r)) = -\frac{\nabla_{\theta, \varphi}^2 Y}{Y} = \lambda \quad (196)$$

Так как левая часть зависит только от  $r$ , правая от  $\theta, \varphi$ , то обе части уравнения равны константе. Обозначим её за  $\lambda$ .

$$\begin{cases} \nabla_r^2 R + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r) - \frac{\hbar^2 \lambda}{2mr^2}) R = 0 \\ \hat{L}^2 Y(\theta, \varphi) = \lambda \hbar^2 Y(\theta, \varphi) \end{cases} \quad (197)$$

$Y$  - собственная функция оператора  $\hat{L}^2$ . По-другому - это собственная функция ротатора. Всё это мы проделываем для произвольного центрально-симметричного потенциала. Пусть

$$Y(\theta, \varphi) = P(\theta) \cdot \Phi(\varphi) \quad (198)$$

Домножим последнее уравнение системы (197) |  $\cdot \frac{\sin^2 \theta}{P\Phi}$

$$\frac{\sin \theta \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \cdot \frac{\partial P}{\partial \theta})}{P} + \lambda \sin^2 \theta = -\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} \cdot \frac{1}{\Phi} = m_l^2 \quad (199)$$

$\Rightarrow$

$$\Phi''(\varphi) + \Phi(\varphi) \cdot m_l^2 = 0 \quad (200)$$

$$\Phi(\varphi) = \exp(im_l \varphi) \quad (201)$$

- собственные функции  $\hat{L}_z$ ,  $m_l$  - целое. (Решения с минусом у экспоненты нет из-за того, что вероятность точно определена).

В центрально-симметричном поле  $\Phi(\varphi) = \cos \varphi \sim e^{i1\varphi} + e^{-i1\varphi}$ .  $m_l = \pm 1$

Теперь рассмотрим уравнение (199) с  $\theta$ :

$\xi = \cos\theta$  - решается через присоединённые функции Лежандра.

$$\lambda = l(l+1)$$

$$l = 0, 1, 2, \dots \Rightarrow L^2 = \hbar^2 l(l+1)$$

$l$  - орбитальное квантовое число

$m_l$  - магнитное квантовое число

Ответ для угловой части:

$$Y_l^{m_l} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \cdot \frac{(l-m_l)!}{(l+m_l)!}} \cdot P_l^{m_l}(\cos\theta) \cdot \exp(im_l\varphi) \quad (202)$$

$$l = 0, 1, \dots$$

$$m_l = 0, 1, \dots$$

Хороший результат: проекция  $m_l \leq$  длины вектора  $\sim l$

## 7.2 Водородо-подобный ион

Рассмотрим атомную систему - водородо-подобный ион [H]- ион.

• - точечный неподвижный заряд

+ $Z_e$  С хорошей точностью в атоме ядро точечное.

$$U(r) = -\frac{ze^2}{r} \quad (203)$$

Рассмотри первое уравнение системы (197)

$$\nabla_r^2 R + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ E - \left( -\frac{z}{r} e^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) \right] R = 0 \quad | \cdot r \quad (204)$$

$$U_{eff}(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$$

График зависимости  $U_{eff}(r)$  рис.(28).

Для  $l = 1$

Если  $E > 0$  - свободная частица

Если  $E < 0$ , то возникают дискретные уровни энергии, когда на расстоянии между двумя точками поворота укладывается целое число полуволен де Бройля:  $n \frac{\lambda_D}{2}$  - где  $n$  - целое. Это квазиклассика.

Пусть  $v(r) = r \cdot R(r)$ . Введём характеристики:

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} - \text{характерный размер}$$

$$Ry = \frac{e^2}{2a_0} = \frac{me^4}{2\hbar^2} - \text{Ридберг}$$

$$\varepsilon = -\frac{E}{Ry} > 0 - \text{безразмерная энергия}$$

$$\xi = \frac{r}{a_0} - \text{безразмерная координата.}$$

Тогда подставляя в уравнение (204):

$$v'' + \left( -\varepsilon + \frac{2z}{\xi} - \frac{l(l+1)}{\xi^2} \right) v = 0 \quad (205)$$

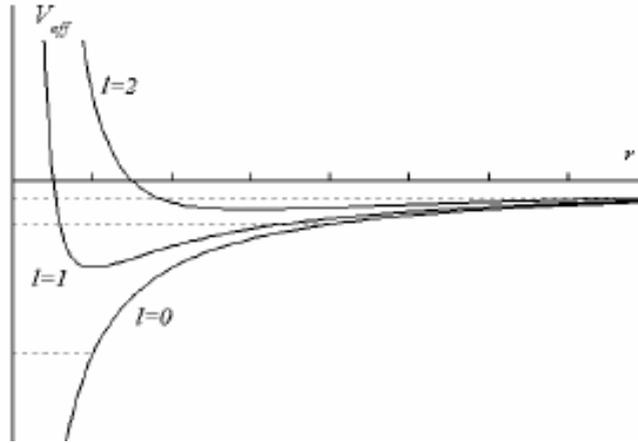


Рис. 28: Эффективный потенциал

Асимптотическое решение:

$$\xi \rightarrow \infty \Rightarrow v_1'' - \varepsilon v_1 = 0$$

$$v_1 \sim e^{-\sqrt{\varepsilon}\xi} \quad (206)$$

$$\text{При } \xi \rightarrow 0 \Rightarrow v_2'' - \frac{l(l+1)v_2}{\xi^2} = 0$$

$$v_2 \sim \xi^{l+1} \quad (207)$$

R ведёт себя как  $\xi^l$  при  $r \rightarrow 0$

$$v(\xi) = \xi^{l+1} \cdot e^{-k\xi} \cdot \tilde{v}(\xi) \quad (208)$$

где  $k = \sqrt{\varepsilon}$

$$v(\xi) = \left( \sum_{\nu=0} A_{\nu} \cdot \xi^{\nu+1+l} \right) \cdot e^{-k\xi} \quad (209)$$

Пусть  $F = \sum_{\nu=0} A_{\nu} \cdot \xi^{\nu+1+l}$

$$v' = F' \cdot e^{-k\xi} - k \cdot e^{-k\xi} \cdot F \quad (210)$$

$$v'' = F'' \cdot e^{-k\xi} - 2kF' \cdot e^{-k\xi} + k^2 \cdot F \cdot e^{-k\xi} \quad (211)$$

Подставляем в (205):

$$F'' - 2kF' + \frac{2z}{\xi}F - \frac{l(l+1)}{\xi^2}F = 0 \quad (212)$$

$$F' = \sum_{\nu} A_{\nu} \cdot (\nu + l + 1) \cdot \xi^{\nu+l} \quad (213)$$

$$F'' = \sum_{\nu} A_{\nu} \cdot (\nu + l + 1)(\nu + l) \cdot \xi^{\nu+l-1} \quad (214)$$

Тогда после подстановки:

$$\sum_{\nu} (\nu+l+1)(\nu+l)A_{\nu} \cdot \xi^{\nu+l-1} - 2k \cdot \sum_{\nu} A_{\nu} \cdot (\nu+l+1) \cdot \xi^{\nu+l} + 2z \sum_{\nu} A_{\nu} \cdot \xi^{\nu+l} - l(l+1) \sum_{\nu} A_{\nu} \cdot \xi^{\nu+l-1} \quad (215)$$

Изменяем порядки суммирования:

$$\sum_{\nu} \{[(\nu+l+1)(\nu+l+2) - l(l+1)]A_{\nu+1} - [2k(\nu+l+1) - 2z]A_{\nu}\} \xi^{\nu+l} = 0 \quad (216)$$

Равенство нулю возможно тогда и только тогда, когда зануляются все коэффициенты при  $\xi^{\nu+l}$ . Тогда:

$$\forall \nu : \frac{A_{\nu+1}}{A_{\nu}} = \frac{2k(\nu+l+1) - 2z}{(\nu+l+1)(\nu+l+2) - l(l+1)} \quad (217)$$

$\nu \rightarrow \infty \Rightarrow \frac{A_{\nu+1}}{A_{\nu}} = \frac{2k}{\nu} \Rightarrow \tilde{v}(\xi) \uparrow$  быстрее, чем  $e^{k\xi} \Rightarrow v \sim e^{-k\xi} \cdot e^{+k\xi} \rightarrow 0$  при  $\xi \rightarrow \infty$

Но у нас должен получаться полином конечной степени:

$$\tilde{v} = \sum_{\nu=0}^{n_r} A_{\nu} \cdot \xi^{\nu+l+1} \quad (218)$$

Причём:

$$A_{\nu < n_r} \neq 0$$

$$A_{\nu = n_r} = 0 \rightarrow A_{n_r} = 0$$

$$A_{\nu > n_r} = 0$$

Условие того, что  $A_{n_r} = 0$ :

$$2k(n_r + l + 1) = 2z, \text{ где } n = n_r + l + 1$$

$$\varepsilon = \frac{z^2}{n^2} \quad (219)$$

$\Rightarrow$  в нашем водородо-подобном ионе дискретный спектр разрешённых уровней энергий

$$E_n = -\frac{z^2}{n^2} Ry \quad (220)$$

## Лекция 8

### 8 Атом водорода

#### 8.1 Асимптотические решения для атома водорода

Из прошлой лекции: [H]- ион

$$U(r) = -\frac{ze^2}{r}, \quad z\text{-безразмерный заряд}$$

$$\hat{H}\Psi(r, \theta, \varphi) = E\Psi$$

Квантовые числа (стационарное состояние):

- 1)  $n$ -главное квантовое число;  $E = -\frac{z^2}{n^2} Ry$
- 2)  $l$  - орбитальное квантовое число;  $|\vec{L}|^2 = \hbar^2 l(l+1)$
- 3)  $m_l$  - магнитное квантовое число  $L_z = m_l \hbar$

$$\Psi_{n,l}^{m_l} = C_{n,l}^{m_l} \cdot R_{n,l}(r) \cdot P_l^{m_l}(\cos\theta) \cdot e^{im_l\varphi} \quad (221)$$

$$P_l^{m_l}(\cos\theta) \cdot e^{im_l\varphi} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad (222)$$

$$Y_{l=1}^{m_l=0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cdot \cos\theta \quad (223)$$

$$Y_{l=1}^{m_l=\pm 1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \cdot \sin\theta \cdot e^{\pm i\varphi} \quad (224)$$

Мы также нашли 2 асимптотики для функции R и нашли нормировку на коэффициент  $g$ .

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}; \quad \rho = 2k_n r \quad (225)$$

$$k_n = \frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar} \Rightarrow \rho = \frac{2zr}{na_0} \quad (226)$$

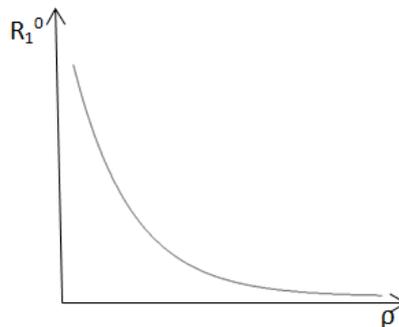


Рис. 29: Угловая часть

Ассимптотика для угловой части:

$$R_{n,l}(\rho) \sim e^{-\frac{\rho}{2}} \cdot \rho^l \cdot L_{n_r}^{2l+1}(\rho) \quad (227)$$

$L_{n_r}^{2l+1}(\rho)$  - полином Лаггера. Определяет количество узлов между нулём и бесконечностью.

$$n = n_r + l + 1$$

$$m_l = -l \dots l$$

$$l = 0, 1, \dots, n - 1$$

Пример:

Полином Лаггера в нулевой степени даёт порядок  $\sim 1$

$$R_{n=1}^{l=0} = C_{10} \cdot e^{-\frac{\rho}{2}} \quad (228)$$

График на рис.(29)

$$D(r) = |R|^2 \cdot 4\pi r^2 dr \quad (229)$$

Вероятность найти электрон на некотором удалении от центра.

В окрестности нуля  $D \sim r^2$ . График зависимости представлен на рис.(30).

$$r_{H.B} = \frac{a_0 n^2}{z}$$

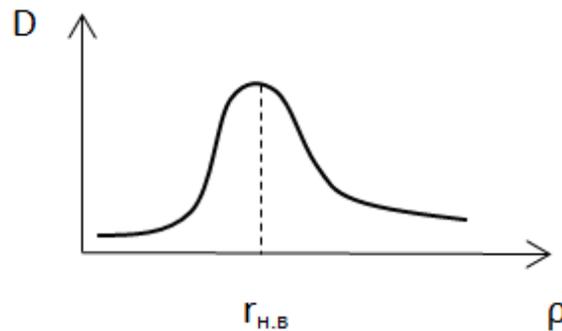


Рис. 30: Вероятность найти электрон

## 8.2 Большие квантовые числа

Напоминаем, что критерий применимости квазиприближения  $\hbar \rightarrow 0$ . Стационарное состояние: определены ли  $L_x, L_y$ ???

О них мы не можем сказать вообще ничего, так как

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] \sim \hbar L_y \quad (230)$$

Если мы точно знаем  $L_z$ , то мы ничего не знаем об  $L_y$  и  $L_x$ .

Это графически можно описать так, как показано на рис.(31) (конус из вектора  $\vec{L}$ ).

$$\langle \hat{L}_x \rangle_{l,m_l} = 0 \quad (231)$$

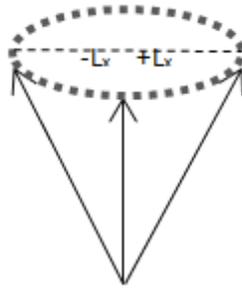


Рис. 31: Вектор L

$$\langle \widehat{L}_y \rangle_{l, m_l} = 0 \quad (232)$$

Иследуем теперь  $\langle L_x^2 \rangle$ ;  $\langle L_y^2 \rangle$  - необходимо для подсчёта дисперсии.

$$\langle L_x^2 \rangle = \langle L^2 \rangle - \langle L_z^2 \rangle - \langle L_y^2 \rangle \quad (233)$$

$$\langle L_y^2 \rangle = \langle L^2 \rangle - \langle L_z^2 \rangle - \langle L_x^2 \rangle \quad (234)$$

$$\langle L_x^2 \rangle = \langle L_y^2 \rangle \Rightarrow \langle L_x^2 \rangle = \langle L_y^2 \rangle = \frac{\langle L^2 \rangle - \langle L_z^2 \rangle}{2} \quad (235)$$

$$\frac{\langle L^2 \rangle - \langle L_z^2 \rangle}{2} = \frac{\hbar^2 l(l+1) - \hbar^2 m_l^2}{2} \quad (236)$$

Если  $l \gg 1$ ;  $m_l = l$ , то радиальное квантовое число  $n_r = 0$ ,  $n \gg 1$   
 $L_z \approx L \approx \hbar l$

$$\frac{\langle L_x^2 \rangle}{\langle L^2 \rangle} = \frac{\langle L_y^2 \rangle}{\langle L^2 \rangle} \sim \frac{1}{l} \quad (237)$$

- погрешность. Дисперсия  $L_x$  и  $L_y$  становится большой, но пренебрежительно малой.

Конус схлопывается в вектор, сонаправленный с  $L_z$  рис.(32).

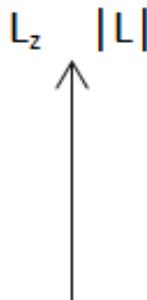


Рис. 32: Предел

В выражении для угловой части присутствует множитель  $P_l^l(\cos\theta)$ .

Нас интересует

$$(P_l^l(\cos\theta))^2 \sim (\sin^2\theta)^l \quad (238)$$

так как характеризует вероятность.

График зависимости представлен на рис.(33)

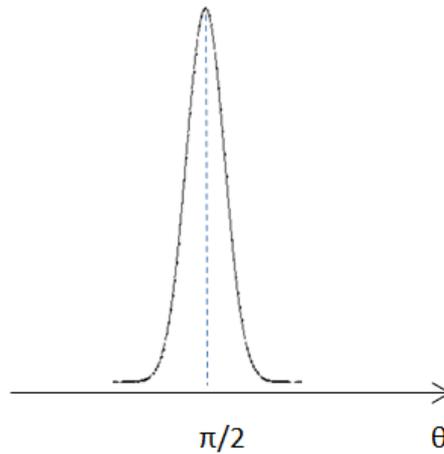


Рис. 33: Угловая часть

То есть  $L_z \approx |\vec{L}|$ . Частица движется в плоскости рис.(34)

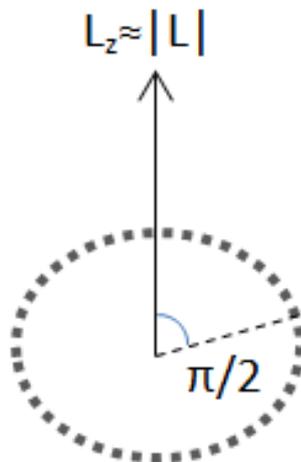


Рис. 34: Вероятность найти электрон

Чтобы появилась динамика движения, необходимо рассматривать нестационарные состояния - суперпозицию некоторого количества стационарных состояний.

Движение вокруг ядра - состояние с круговым током (плотностью потока вероятности).

$$\vec{j}_e = \frac{\hbar l}{2mi} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \quad (239)$$

- плотность тока

$$R = R^* \Rightarrow j_\rho = 0 \quad (240)$$

Это хороший результат с физической точки зрения, иначе бы каждый атом был источником тока.

По таким же соображениям получим:  $j_\theta = 0$

$$j_\varphi = \frac{e\hbar}{2mi} \cdot (R_{n,l})^2 (P_l^{m_l})^2 \cdot \frac{1}{r \cdot \sin\theta} (e^{-im_l\varphi} \frac{\partial}{\partial\varphi} e^{im_l\varphi} - e^{im_l\varphi} \frac{\partial}{\partial\varphi} e^{-im_l\varphi}) \quad (241)$$

$$j_\varphi = \frac{e\hbar}{2mi} \cdot (R_{n,l})^2 (P_l^{m_l})^2 \cdot \frac{1}{r \cdot \sin\theta} (im_l - (-im_l)) \quad (242)$$

$$j_\varphi = \frac{e\hbar}{m} \cdot (R_{n,l})^2 (P_l^{m_l})^2 \cdot \frac{m_l}{r \cdot \sin\theta} \quad (243)$$

Мы получили, что  $\sin\theta = \sin\frac{\pi}{2} = 1$ ;  $L \approx \hbar m_l$

$$j_\varphi = \frac{eL}{mr} \cdot (R_{n,l})^2 (P_l^{m_l})^2 \sim \rho_e v \quad (244)$$

$$\Psi_{classical} \sim \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx\right) \quad (245)$$

$\Rightarrow$  условие однозначности.

$$\oint p(x) dx = 2\pi n \hbar \quad (246)$$

где  $n$  - целое число (главное квантовое число).

### 8.3 Атом водорода по Бору

Для круговой траектории: правило квантования по Бору

$$L_z = n\hbar = mvr_n$$

Для разрешённой орбиты  $m \frac{v_n^2}{r} = \frac{ze^2}{r^2}$

$$mv_n^2 r = ze^2 \Rightarrow Lv_n = ze^2 \Rightarrow v_n = \frac{ze^2}{L} = \frac{z}{n} \cdot \frac{e^2}{\hbar c} \cdot c \quad (247)$$

$\frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137} = \alpha$  - постоянная тонкой структуры.

Напомним, что уровень энергии разрешён, если укладывается только целое число де Бройлевских длин волн.

$$mv_n r_n = n\hbar \quad (248)$$

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{mze^2} = \frac{n^2}{z} \cdot a_0 \quad (249)$$

где величина  $a_0 \approx 0,5 \text{ \AA}$ - Боровский радиус

Применим теорему Вириала: При финитном движении соотношение между средней кинетической и средней потенциальной энергией определяется степенью потенциала.

$$U(r) \sim r^{-1} \Rightarrow \overline{T}_{sr} = -\frac{1}{2}\overline{U} \quad (250)$$

$$E = -\overline{T} = -\frac{mv_n^2}{2} = -\frac{z^2}{n^2}Ry \quad (251)$$

$$Ry = \frac{me^4}{2\hbar} = 13,6 \text{ эВ}$$

Слабое место в данной теории:  $L = 0$  - такое состояние существует, но  $L = n\hbar$ , значит, для этого необходимо, чтобы  $n = 0$ , но в рамках теории это невозможно, так как  $n \geq 1$ .

## 8.4 Эксперименты

Эксперименты, подтверждающие на практике справедливость наших положений:

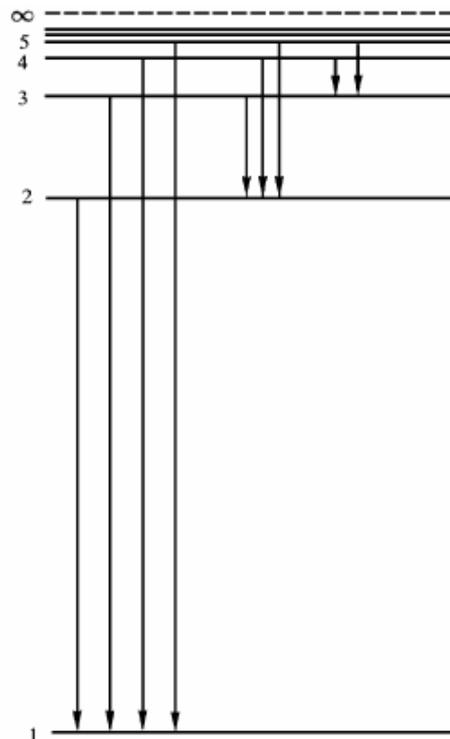


Рис. 35: Спектры атомарного водорода

Переход между стационарными состояниями сопровождается излучением или поглощением порций квантов, причём частота определяется из закона сохранения энергии и равна разнице энергий между уровнями:  $\hbar\omega_{m,n} = |E_m - E_n|$ , где  $m$  и  $n$  - уровни энергий.

В итоге получаем линии спектра атома водорода рис(35), которые хорошо описываются нашей теорией.

## Лекция 9

### 9 Спин. Спин-орбитальное взаимодействие

#### 9.1 Магнитный момент

В стационарных состояниях, где определён  $L_z$ , у нас есть циркулирующий ток. С ним мы можем связать магнитный момент. В квазиклассике мы знаем  $\vec{L}, L_z$ . Волновой пакет вращается - значит вращается заряд и есть магнитный момент.

$$\vec{\mu} = \frac{1}{c} I \vec{S} \quad (252)$$

$$I = -\frac{e}{T} = -\frac{e\omega}{2\pi} \quad (253)$$

По предположению орбита круговая:

$$\vec{\mu}_z = -\frac{e\omega}{2\pi c} \cdot \pi r^2 \vec{e}_z \quad | \cdot \frac{m}{m} \quad (254)$$

$$L_z = mvr$$

$$\vec{\mu}_z = -\frac{e}{2mc} \cdot \vec{L}_z \quad (255)$$

где  $\frac{e}{2mc}$  - гиромагнитное соотношение.

Тогда получаем

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2mc} \cdot \vec{L} \quad (256)$$

Переходим к квантовой механике:

$$\widehat{\mu}_z = -\frac{e}{2mc} \cdot \widehat{L}_z \quad (257)$$

$$\vec{\mu}_z = -\frac{e}{2mc} \cdot \hbar m_l \quad (258)$$

$$\mu_0 = \frac{e\hbar}{2mc} = 0,927 \cdot 10^{-20} \text{эрг/Гс} - \text{магнетон Бора.}$$

#### 9.2 Эксперимент Штерна - Герлаха

Есть источник атомов, из которого вылетают частицы с магнитным моментом. Далее они попадают в область между магнитами, где создан градиент магнитного поля  $\frac{\partial H}{\partial z}$ . Мы работаем в квазиклассике, поэтому можем применять теорему Эренфеста. В классике верно:

$$F = -\mu_z \frac{\partial H}{\partial z} \quad (259)$$

В зависимости от  $\mu_z$  - разная сила.

В результате формируются засвеченные области.

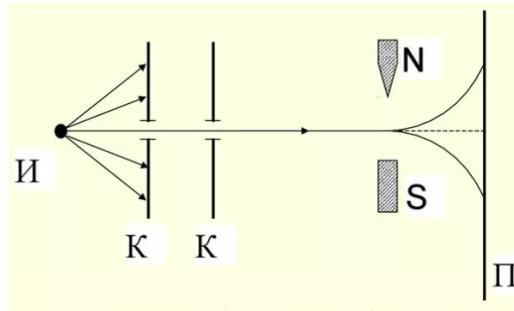


Рис. 36: Схема эксперимента опыта Штерна-Герлаха

$m_l = -l \dots 0 \dots l$  ( всего  $2l + 1$ ). В общем случае разные значения  $m_l$ . Провели эксперимент и увидели всего 2 засвеченные полосы.

Ещё до квантовой механики считалось, что это связано с направлением вращения электрона по орбите.

В наше время считается, что электрон имеет собственный магнитный момент. Произведём классическую оценку скорости вращения электрона:

Введём  $r_e$  - классический радиус электрона.

$$mc^2 = \frac{e^2}{r_e} \quad (260)$$

Из полученной оценки следует, что скорость на экваторе такого электрона  $\gg c$ , то есть такое описание не годится.

Требуется рассмотрение релятивистского уравнения, но в нашем курсе основное уравнение - это нестационарное уравнение Шрёдингера - не является Лоренц - инвариантным.

Воспользуемся результатом из релятивистской квантовой механики:

$$\vec{\mu}_c = -2 \frac{e}{2mc} \vec{S} \quad (261)$$

где  $\vec{\mu}_c$  - собственный магнитный момент,  $\vec{S}$  - спин.

6

### 9.3 Оператор спина

Мы знаем про оператор спина  $\hat{S}$ , что  $S_z = \pm \frac{\hbar}{2}$  - весь спектр собственных значений. Линейному эрмитовому оператору  $\hat{F}$  действующему в Гильбертовом пространстве с произвольно выбранным базисом  $f_k$  ставится во взаимно однозначное соответствие матрица:

$$\hat{F} \longrightarrow F_{ik} = \langle f_i | \hat{F} | f_k \rangle \quad (262)$$

Если  $|f_k\rangle$  - собственная функция оператора  $\hat{F} \Rightarrow$  мы получаем диагональную матрицу:

$$\begin{pmatrix} F_1 & 0 & 0 \\ 0 & F_2 & 0 \\ 0 & 0 & F_3 \end{pmatrix} \quad (263)$$

Но у нас всего 2 собственных значения, значит, в базисе собственных функций:

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (264)$$

Поставим задачу об отыскании собственных функций оператора  $\hat{S}_z$

$$\hat{S}_z \chi_{\pm} = \pm \frac{\hbar}{2} \chi_{\pm} \quad (265)$$

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (266)$$

Произвольное интересующее нас состояние в рамках нашего подхода представляется в виде столбца:

$$\chi = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (267)$$

С вероятностью  $|\alpha|^2$  значение у нас  $\frac{\hbar}{2}$ ;

С вероятностью  $|\beta|^2$  значение у нас  $-\frac{\hbar}{2}$ .

Получили кубит - двухуровневую квантовую систему - два микроскопически различных базисных состояний.

$$\langle \hat{S}_z \rangle_{\chi} = \langle \chi | \hat{S}_z | \chi \rangle = (\alpha^* \quad \beta^*) \cdot \begin{pmatrix} +\frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = |\alpha|^2 \cdot \frac{\hbar}{2} - |\beta|^2 \cdot \frac{\hbar}{2} \quad (268)$$

Получается электрон - спиновая частица, но в основном положении 1 квантовой механики нашего курса, мы договаривались рассматривать бесспиновые частицы. Теперь для электрона произвольное состояние описывается в виде спинора:

$$= \begin{pmatrix} \Psi_+(\vec{r}, t) \\ \Psi_-(\vec{r}, t) \end{pmatrix} \longrightarrow \Psi(\vec{r}, t) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad (269)$$

Для [H]- иона это означает:

Было 3 квантовых числа:  $n, l, m_l$  - задавая их, однозначно задавалось состояние системы.

Теперь появляется 4 физическая величина, характеризующая основное состояние  $S_z$  - проекция спина на выбранную ось, и к этой физической величине квантовое число  $m_s$ .

$$m_s = \pm \frac{1}{2} \Rightarrow S_z = m_s \hbar \quad (270)$$

Было бы хорошо ввести аналог орбитального числа:

$$m_s = -s \dots s \Rightarrow s = \frac{1}{2} \quad (271)$$

$$|\vec{S}|^2 = \hbar^2 s(s+1) = \frac{3\hbar^2}{4} \quad (272)$$

Поставим задачу найти явно операторы  $\hat{S}_x$  и  $\hat{S}_y$ :

$$\hat{S}_x \rightarrow \frac{\hbar}{2} \sigma_x - \text{матрицы}$$

$$\hat{S}_y \rightarrow \frac{\hbar}{2} \sigma_y - \text{Паули}$$

$$[\hat{S}_z; \hat{S}_x] = ? \hat{S}_y$$

## 9.4 Полный момент количества движения

$$\vec{L} + \vec{S} = \vec{J}$$

$$[\hat{L}^2; \hat{S}^2] = [\hat{L}_s; \hat{S}_z] = 0 \quad (273)$$

[H]-ион  $\Rightarrow |n, l, m_l > s, m_s$

$$|\vec{J}| = \hbar \sqrt{J(J+1)} \rightarrow |J; M_J \dots > \quad (274)$$

$$J_z = M_J \hbar; M_J = -J \dots J \quad (275)$$

$$J = |L - S| \dots (L + S) \quad (276)$$

$m_l \backslash m_s$	$m_l$	-1	0	+1	
	$m_s$	-1/2	1/2		
-1/2		-3/2	-1/2	1/2	J=3/2
1/2		-1/2	1/2	3/2	

J=1/2

Рис. 37: Моменты количества движения

Показательство:

$$\hat{J}_z |l, s; J, M_J > = M_J |l, s, J, M_J > \quad (277)$$

$$\hat{J}_z |l, m_l > |s, m_s > = (\hat{L}_z + \hat{S}_z) |l, m_l > |s, m_s > = (m_l + m_s) |l, m_l > |s, m_s > \quad (278)$$

$$M_J = m_l + m_s \quad (279)$$

$J_{max} = l + s$ . Теперь найдём  $J_{min}$  по индукции.

Пусть  $L=0, s=1/2$ , тогда  $J_{max} = 1/2, J_{min} = 1/2$ . И  $J_{min} = |L - S|$  - верно.

$l=1$ : составим таблицу рис.(37).

Есть состояние - это означает, что по квантовым числам можно записать функцию  $\Psi$  через спинор.

$$J = l \pm \frac{1}{2} \quad (280)$$

При увеличении  $l$  структура таблицы не будет меняться, значит, по индукции мы доказали что  $J_{min} = |L - S|$

## 9.5 Теория возмущений

Спектры в нулевом приближении подтверждены:

$$E_n^{(0)} = -\frac{z^2}{n^2} Ry \quad (281)$$

Но если мы посмотрим на атом вооружённым глазом, то мы увидим не одну линию, а две - расщепление, тонкая структура.

До этого мы определили, что  $J$  имеет два значения.

$$\hat{H}_0 \Psi_n^0 = E_n^0 \Psi_n^0 \quad (282)$$

Пусть спектр дискретный и невырожденный. Реальный Гамильтониан имеет вид:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \quad (283)$$

где  $\hat{V}$  - малое "возмущение".

Возникает вопрос: как решить задачу на поиск собственных значений и собственных функций?  $\hat{H} \Psi_n = E_n \Psi_n$

Рассмотрим первый порядок приближения:

$$E_n = E_n^0 + \delta E_n \quad (284)$$

$$\Psi_n = \Psi_n^0 + \delta \Psi_n \quad (285)$$

$$(\hat{H} + \hat{V})(\Psi_n^0 + \delta \Psi_n) = (E_n^0 + \delta E_n)(\Psi_n^0 + \delta \Psi_n) \quad (286)$$

$\hat{V} \delta \Psi_n$  и  $\delta E_n \cdot \delta \Psi_n$  величины меньшего порядка малости, ими мы пренебрегаем.

$$\hat{H}_0 \Psi_n^0 + \hat{V} \Psi_n^0 + \hat{H}_0 \delta \Psi_n = E_n^0 \Psi_n^0 + E_n^0 \delta \Psi_n + \delta E_n \Psi_n^0 \quad (287)$$

Так как это элементы Гильбертова пространства, то мы можем записать в таком виде:

$$\hat{V} |\Psi_n^0\rangle + \hat{H}_0 |\delta \Psi_n\rangle = E_n^0 |\delta \Psi_n\rangle + \delta E_n |\Psi_n^0\rangle \quad |\cdot\rangle \langle \Psi_n^0| \quad (288)$$

$$\delta E_n = V_{nn} + \langle \Psi_n^0 | (\hat{H}_0 - E_n^0) | \delta \Psi_n \rangle \quad (289)$$

$V_{nn} = \langle \hat{V} \rangle_{\Psi_n^0}$  - матричный элемент возмущения

$$\delta \Psi_n = \sum_k \lambda_{kn} |\Psi_k^0\rangle \quad (290)$$

Если  $k \neq n$ , то скалярное произведение равно нулю.

Если  $k = n$ , то ноль даёт  $\hat{H}_0 - E_n^0$ .

Значит в первом порядке приближения:

$$\delta E_n = V_{nn} = \langle \hat{V} \rangle_{\Psi_n^0} \quad (291)$$

Вернёмся к уравнению (288). Домножим его на  $\langle \Psi_m^0$ , где  $m \neq n$ .

Получим:

$$V_{mn} + \lambda_{mn} E_m^0 = E_n^0 \lambda_{mn} \quad (292)$$

$$\lambda_{mn} = \frac{V_{mn}}{E_n^0 - E_m^0} \quad (293)$$

$$\delta \Psi_n^0 = \sum_{m \neq n} \frac{V_{mn}}{E_n^0 - E_m^0} |\Psi_m^0 \rangle \quad (294)$$

## Лекция 10

### 10 Спин-орбитальное взаимодействие

#### 10.1 Оценка возмущения

Мы рассматривали уравнение:  $\hat{H}_0 \Psi_n = E_n^{(0)} \Psi_n$  для водородо-подобного иона [Н].  
 $E_n^0 = -\frac{z^2}{n^2} Ry$ . Необходимо определить вид  $\hat{V}$ -?  
Источник ошибки - не учтены релятивистские эффекты.

$$T = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} - m c^2 = m c^2 \cdot \left( \sqrt{1 + \left(\frac{p}{m c}\right)^2} - 1 \right) \quad (295)$$

Используя формулу для малого  $x$ :  $(1+x)^{\frac{1}{2}} = 1 + \frac{1}{2}x + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \left(-\frac{1}{2}\right)x^2$

$$T = m c^2 \cdot \left[ 1 + \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{p}{m c}\right)^2 + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \left(-\frac{1}{2}\right) \left(\frac{p}{m c}\right)^4 - 1 \right] = \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{8} \cdot m c^2 \cdot \left(\frac{p}{m c}\right)^4 = T_0 - \Delta T \quad (296)$$

где  $\Delta T$  - возмущение.

$a_0$  - характерный размер (Боровский радиус).

$$p \cdot a_0 \sim \hbar \Rightarrow \frac{p}{m c} = \frac{e^2}{\hbar c} = \alpha \quad (297)$$

$$Ry \Rightarrow \frac{e^2}{2a_0} \longrightarrow \frac{1}{2} \alpha^2 m c^2 \quad (298)$$

$$r_e : \lambda_c : a_0 = \alpha^2 : \alpha : 1 \quad (299)$$

где  $r_e = \frac{e^2}{m c}$  - радиус электрона,  $\lambda_c$  - комптоновская длина волны.

$$2Ry : \frac{e^2}{\lambda_c} : m c^2 = \alpha^2 : \alpha : 1 \quad (300)$$

$$\lambda_c = \sqrt{r_e \cdot a_0}.$$

Все величины завязаны с  $\alpha$ . И в рамках нашего курса минимальный размер  $r_e$  - меньше уже ядерная физика, максимальная энергия  $m c^2$  - далее уже сильные релятивистские эффекты, минимальная энергия  $\sim Ry$ .

$$\Delta T_{rel} \sim \alpha^2 Ry \quad (301)$$

Но также нужно учитывать поправку на потенциальную энергию  $U(r) = -\frac{z e^2}{R}$ .  
Электрон обладает спином, есть собственный магнитный момент. Также в атоме водорода есть круговой ток, связанный с орбитальным движением.

Спин-орбитальное взаимодействие - взаимодействие между собой двух магнитных моментов: спина электрона и орбитального момента.

$$\frac{\mu_0}{a_0} = \frac{e \hbar}{2 m c} \cdot \frac{m e^2}{\hbar^2} = \frac{e}{2} \cdot \alpha \quad (302)$$

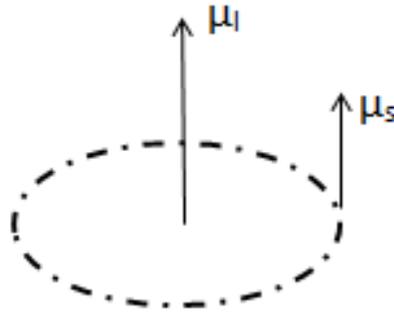


Рис. 38: Спин-орбитальное взаимодействие

$$\mu_0 = \frac{1}{2}\alpha(ea_0) \quad (303)$$

где  $ea_0 = d_0$ - борковский электромагнитный момент.

$$U_{l,s} \sim \frac{\mu_e \mu_s}{a_0^3} \sim \frac{(\frac{\mu_0}{a_0})^2}{a_0} \sim \alpha^2 Ry \quad (304)$$

В рамках теории возмущения учитывается и потенциальная, и кинетическая поправки.

Учёт кинетической поправки:

$$\Delta E_{rel} = \langle \Delta T \rangle_{n,l} = \langle -\frac{1}{8}mc^2 \cdot (\frac{p}{mc})^4 \rangle_{n,l} = \langle -\frac{1}{2mc^2} \cdot (T_0)^2 \rangle_{n,l} = \langle -\frac{1}{2mc^2} [E_n^0 - U(r)]^2 \rangle_{n,l} \quad (305)$$

$$\langle \frac{1}{r} \rangle_{n,l} - ?; \quad \langle \frac{1}{r^2} \rangle_{n,l} - ?$$

$$\Delta E_{rel} = -\frac{\alpha^2 z^4}{n^3} (\frac{1}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n}) Ry \quad (306)$$

$$\Delta E_{l,s} = \langle U_{l,s} \rangle_{n,l}; \quad (307)$$

$$U_{l,s} = -(\vec{\mu}_s \vec{H}_e) \quad (308)$$

где  $\vec{H}_e$ - магнитное поле.

Если мы сядем на электрон, то вокруг него будет крутиться ядро, течёт ток и тем самым создаётся магнитное поле.

$$\vec{H}_e = \frac{1}{c} [\vec{e} \times \vec{v}] \quad (309)$$

где  $\vec{e} = \frac{1}{e} (-\nabla U)$

$$\Delta E_{l,s} = \frac{\alpha^2 z^4}{n^3} \cdot Ry \cdot \frac{(\vec{l} \cdot \vec{s})}{l(l + \frac{1}{2})(l + 1)} \quad (310)$$

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s} \quad (311)$$

$$|\vec{j}|^2 = |\vec{l}|^2 + 2(\vec{l} \cdot \vec{s}) + |\vec{s}|^2 \quad (312)$$

$$j(j+1) = l(l+1) + 2(\vec{l} \cdot \vec{s}) + s(s+1) \quad (313)$$

$s(s+1) = \frac{3}{4}$ . Мы не можем посчитать спин-орбитальное взаимодействие нулевым.  $U_{ls} \neq 0$ , то мы не можем утверждать равенство нулю, некоторых коммутационных соотношений:

$$[\hat{H}; \hat{L}_z] \neq 0 \quad (314)$$

$$[\hat{H}; \hat{S}_z] \neq 0 \quad (315)$$

Тогда  $m_s$  и  $m_l$  - плохие квантовые числа (хорошие квантовые числа - это те, которые помогают точно определить значения точно измеренных величин, а у нас  $S_z$  и  $L_z$  - точно не определены, тогда для описания используем квантовые числа  $n, l, j, m_j$ ).

$j = l \pm \frac{1}{2}$ . Подставляя эти значения в уравнение (313), получим:

$$2(\vec{l} \cdot \vec{s})_+ = l \quad 2(\vec{l} \cdot \vec{s})_- = -l - 1$$

С учётом потенциальной и кинетической поправки

$$\Delta E = \frac{\alpha^2 z^4}{n^3} \cdot Ry \cdot \left( \frac{1}{l + \frac{1}{2}} - \frac{(\vec{l} \cdot \vec{s})}{l(l + \frac{1}{2})(l + 1)} - \frac{3}{4n} \right) \quad (316)$$

$$\frac{1}{l + \frac{1}{2}} - \frac{(\vec{l} \cdot \vec{s})}{l(l + \frac{1}{2})(l + 1)} = \frac{1}{j + \frac{1}{2}} \quad (317)$$

и для  $2(\vec{l} \cdot \vec{s})_+ = l$  и для  $2(\vec{l} \cdot \vec{s})_- = -l - 1$   
Значит,  $\Delta E$  - зависит только от  $n$  и  $j$

$$\Delta E = \frac{\alpha^2 z^4}{n^3} \cdot Ry \cdot \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \quad (318)$$

## 10.2 Тонкая структура

Основное состояние:  $E = -z^2 Ry, n = 1, l = 0$ . Тогда  $j = \frac{1}{2}$  и расщепление  $\Delta E = \frac{1}{4} \alpha^2 z^4 Ry = \frac{1}{4} \Delta$ .

Обозначение этого уровня:  $1^2S_{\frac{1}{2}}$ , где 1 -  $n$ ;  $2=2s+1$  - мультиплетность; S - обозначение для характеристики орбитального момента;  $\frac{1}{2} = j$ .

Первое возбуждённое состояние:  $n=2; j = \frac{1}{2}; l=0 \Rightarrow \Delta E = \frac{5}{64} \Delta$ .

Обозначение:  $2^2S_{\frac{1}{2}} (l = 0 - S)$

Так как от  $l$  не зависит, то  $\Delta E$  при  $l = 1$  такое же как и для  $l = 0$  в предыдущем.

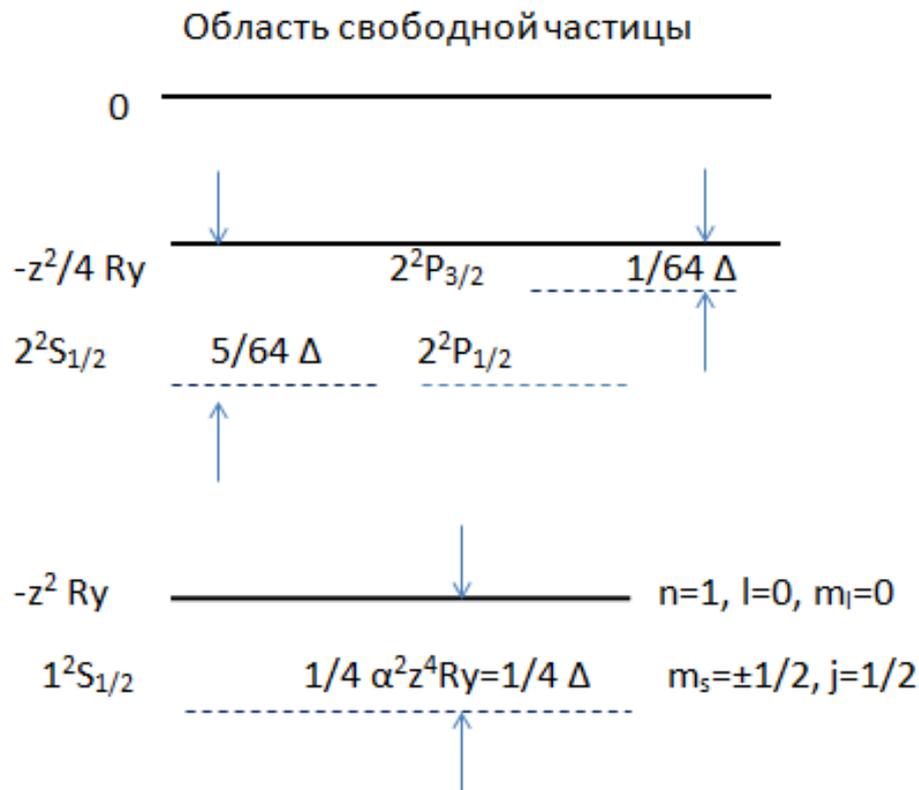


Рис. 39: Расщепление

Обозначение уровня:  $2^2P_{\frac{1}{2}}$ . Величина расщепления уровня быстро растёт при увеличении  $z$ .

$$\frac{1}{16}\Delta \sim \text{если } (z=1) 10^{-5}\text{эВ} \sim 10\text{ГГц}$$

### 10.3 Сверхтонкая структура

Кроме тонкой структуры есть ещё и сверхтонкая. До этого момента не обсуждали наличие магнитного момента у ядра. Магнитный момент ядра  $I$  - суммарный спиновый момент, входящих в него нуклонов.

Совсем полный момент:

$$\vec{F} = \vec{J} + \vec{I} \quad (319)$$

Где  $\vec{J}$  - электронный, а  $\vec{I}$  - ядерный магнитные моменты.

$(\vec{\mu}_J \cdot \vec{\mu}_I)$  - магнитное взаимодействие электронной и ядерной части.

$$|\vec{I}| = \hbar^2 I(I+1) \quad (320)$$

$$\mu_I \sim \frac{e\hbar}{2Mc} \Rightarrow \Delta E_{st} \sim \alpha^2 Ry \frac{m}{M} \sim 10^{-6} eV \quad (321)$$

где  $M$  - масса ядра.

По заданному  $j$  и  $n$  можно определить число компонент сверхтонкой структуры:

$$F = |J - I| \dots |J + I|$$

## 10.4 Многоэлектронные системы

Необходимо исправить основные положения квантовой механики для многоэлектронной системы:

1)  $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, \dots, t)$  - задаёт амплитуду вероятности обнаружить частицу '1' -  $\vec{r}_1$ , частицу '2' -  $\vec{r}_2$  и так далее.

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \Rightarrow \rho_1(\vec{r}) = \int |\Phi(r, \vec{r}_2)|^2 d^3r_2 \quad (322)$$

Замечание на оценку 5 на экзамене: в общем случае мы не знаем волновые функции отдельных частиц.

Операторы плотности (матрицы плотности).

$\rho(q; q') = \int \Psi^*(q; Q)\Psi(q'; Q)dQ$  - характеристика, описывающая подсистему.

$$\hat{\rho} = \sum \omega_k |\Psi_k\rangle \langle \Psi_k| \quad (323)$$

Появляется неопределённость второго уровня (не знаем волновую функцию). Если слабое межэлектронное взаимодействие, то можно вводить одноэлектронные функции.

2) В одномерном пространстве:

$$\hat{H} = \hat{H}_1(x_1) + \hat{H}_2(x_2) + \hat{V}(x_1, x_2) \quad (324)$$

Чтобы можно было использовать одноэлектронные волновые функции необходимо, чтобы  $\hat{V}(x_1, x_2)$  можно было выбросить.

$$\Psi(x_1, x_2) = \Psi_1(x_1) \cdot \Psi_2(x_2) \quad (325)$$

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad \parallel \cdot \frac{1}{\Psi_1\Psi_2} \quad (326)$$

$$\frac{\hat{H}_1\Psi_1}{\Psi_1} + \frac{\hat{H}_2\Psi_2}{\Psi_2} = E \Rightarrow E_1 + E_2 = E \quad (327)$$

Для супернулевого приближения в атоме Гелия, пренебрегая взаимодействием электронов:  $n_1 = 1 \Rightarrow -z^2 Ry$

$$n_2 = 2 \Rightarrow -\frac{5}{4}z^2 Ry$$

А можно ли записать волновую функцию электрона в этом супернулевом приближении? Ответ нет. Из-за принципа тождественности.

## 10.5 Принцип тождественности частиц

Принцип тождественности частиц в квантовой механике: одинаковые частицы являются в принципе неразличимыми.

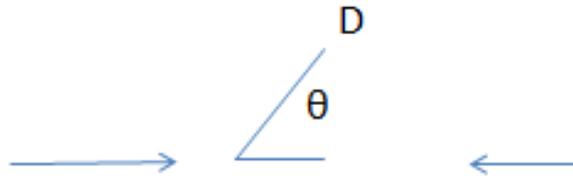


Рис. 40: Соударение двух объектов

Пример с классикой: два бильярдных шара мы можем различить, поставив на них метку, при этом не изменяются физические свойства.

Аналогично с двумя двигающимися друг на друга одинаковых объекта: постоянно наблюдаем за одним. Вероятность зафиксировать объект детектором:

$$P_{kl} = P(\theta) + P(\pi - \theta) \quad (328)$$

Если же у нас две квантовые частицы, то за одной частицей мы не можем наблюдать:

$$F_{kv} = F(\theta) + F(\pi - \theta) \quad (329)$$

- амплитуда вероятности.

$$P_{kv} = P(\theta) + P(\pi - \theta) + U_{int} \quad (330)$$

где  $U_{int}$  - интерферирующий член.

Оператор перестановки:

$$\hat{P}\Psi(x_1, x_2) = \Psi(x_2, x_1) = P\Psi(x_1, x_2) \quad (331)$$

если частицы одинаковые и не взаимодействующие.

$$\hat{P}^2\Psi(x_1, x_2) = \Psi(x_2, x_1) = P^2\Psi(x_1, x_2) \quad (332)$$

$$P^2 = 1 \Rightarrow P = \pm 1 \quad (333)$$

А это означает, что  $\Psi(x_1, x_2) = \Psi_1(x_1) \cdot \Psi_2(x_2)$  - не верно.

## Лекция 11

### 11 Метод самосогласованного поля

#### 11.1 Бозоны и фермионы

Если мы выбрасываем взаимодействие между электронами:  $\Psi_1(1)\Psi_2(2)$  где  $\Psi_1$  - набор первых квантовых чисел,  $\Psi_2$  - набор вторых квантовых чисел. (1) - координата первой частицы, (2) - координата второй частицы.

Но  $\Psi_2(1)\Psi_1(2)$  - также собственная функция оператора Гамильтона с такой же энергией.

Но эти функции неправильные (не являются собственными функциями оператора перестановки), а вот  $\Psi_1(1)\Psi_2(2) + \Psi_2(1)\Psi_1(2)$  правильная. Но необходимо помнить, что функция должна быть нормирована: (веса функций одинаковые по модулю)

$$[\Psi_1(1)\Psi_2(2) + \Psi_2(1)\Psi_1(2)] \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (334)$$

Можно все квантовые частицы разбить на 2 класса

1) С целым значением спина (например, фотоны; все переносчики взаимодействий).

Их волновая функция является симметричной - подчиняются статистике Бозе-Эйнштейна и их название бозоны.

2) С полуцелым значением спина (например, электроны). Их волновая функция антисимметричная, подчиняются статистике Ферми-Дирака и их название фермионы.

А какая же будет функция для  $n$  частиц? Правильная волновая функция по аналогии должна являться суперпозицией произведений:

$$\frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \Psi_1(1) & \Psi_1(2) & \dots \\ \Psi_2(1) & \Psi_2(2) & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \\ \vdots & \vdots & \dots \end{vmatrix} \quad (335)$$

- детерминант Слэтера. Волновая функция для  $n$  невзаимодействующих фермионов. Сумма является знакопеременной.

Для бозонов берём ту же самую матрицу, но считаем для неё перманент.

Для фермионов: если два столбца совпадают, то получим равенство нулю волновой функции  $\Rightarrow \Psi \equiv 0 \Rightarrow$  получаем принцип запрета Паули (то есть следует напрямую из принципа тождественности частиц).

## 11.2 Метод самосогласованного поля

Рассмотрим многоэлектронный атом. Чтобы описать электрон, необходимо учесть его взаимодействие не только с ядром, но и с другими электронами. Это конечно непонятно как решать не только аналитически, но и численно.

Предположения для описания в рамках наших предыдущих фактов:

1) Взаимодействия между электронами слабые, значит, существуют волновые функции отдельных электронов.

2) Можно заменить взаимодействие каждого электрона с каждым на взаимодействие электрона с самосогласованным полем.

Возьмём электрон  $\odot$ . Запишем потенциал, в котором наш электрон находится.  $U_{sam}$  - сумма потенциалов других электронов. Также электрон находится в поле ядра

$$U_{eff} = -\frac{ze^2}{r_i} + e \sum_{j \neq i}^N \varphi_j(r_i) \quad (336)$$

где  $N$  - количество электронов,  $\varphi_j(r_i)$  - потенциал от  $j$ -ого электрона для  $i$ -ого

$$\varphi_j(\vec{r}) = \int \frac{|\Psi_j(\vec{r}_j)|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_j|} d^3r_j \quad (337)$$

Численный метод для поиска точного решения:

$$(\hat{T}_i + U_{eff}(r_i))\Psi_i(\vec{r}_i) = E_i\Psi_i(\vec{r}_i) \quad (338)$$

Начинаем с водородоподобной функции

Получается итерационный процесс волновых функций и с каждой итерацией мы приближаемся к волновой функции стационарного состояния.

Выделяются иерархические группы для уровней, как в биологии:

Конфигурация многоэлектронного атома:  $\Rightarrow$

$$1s^1 2s^1 2p^2 3p^6 \dots \quad (339)$$

где число перед буквой обозначает главное квантовое число; буква даёт обозначение орбитального квантового числа; число над буквой - это количество электронов с квантовым числом  $n$  и  $l$

Оболочкой в многоэлектронном атоме называют совокупность электронов с одинаковым главным квантовым числом.

Подоболочкой в многоэлектронном атоме называют совокупность электронов с одинаковыми числами  $n$  и  $l$  ( $1s, 2s, 2p$  - примеры подоболочек).

Конфигурации основных состояний у всех атомов очень схожи:

$$Li : 1s^2 2s^1 \quad (340)$$

$$Na : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^1 \quad (341)$$

Характерная особенность - это полностью заполнены все подоболочки, кроме одной: на последней, не до конца заполненной, находится 1 электрон.

При фиксированном  $n : l = 0 \dots l - 1 \rightarrow m_l = -l \dots l \quad m_s = \pm \frac{1}{2}$ . На подболочке конечное число электронов - принцип запрета Паули. Ёмкость одной оболочки :  $2n^2$   
Модель атома можно представить в виде электронного облака вокруг ядра и движущегося вокруг всего этого 1 электрона.  $z'$ -эффективный заряд.

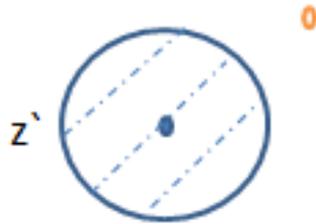


Рис. 41: Модель атома

$$U_{eff} = -\frac{e^2}{r}, \quad r \gg a_0 \quad (342)$$

Когда электрон очень близко подходит к ядру, то из-за эффекта экранировки подошедший электрон видит заряд  $ze$

$$U_{eff} = -\frac{ze^2}{r}, \quad r \ll a_0 \quad (343)$$

$U_{real}$  - реальный график эффективной энергии.

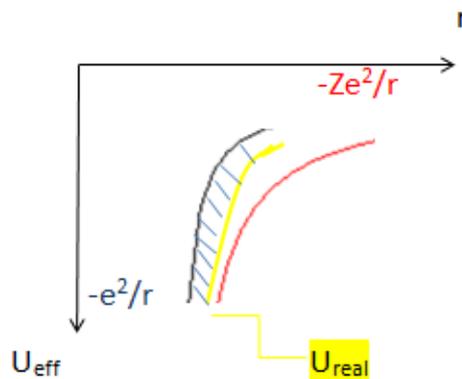


Рис. 42: Эффективная энергия

Заштрихованная область -  $\delta \hat{V}$ .

$\frac{e^2}{r}$  энергия системы в нулевом приближении.

$$E_n^{(0)} = -\frac{Ry}{n^2} \quad (344)$$

- атом водорода.

$$\delta E_n = \int \delta V R_{n,l}^2 d^3r \quad (345)$$

$R_{n,l}$  - радиальная часть.

При увеличении  $r$  поправка  $\delta V \rightarrow 0$

$r \ll a_0$

$R_{n,l}^2$  в окрестности нуля  $(r^l)^2$

Чем больше  $l$ , тем меньше поправка к уровням энергии ( $\delta E_n \downarrow$ , если  $l \uparrow$ ).

Грубее всего энергию определяет конфигурация (через квантовые числа и количество электронов).

### 11.3 Учёт межэлектронного взаимодействия

Возьмём атом гелия - атом с 2 электронами. Гелие-подобная система - на единственном не до конца заполненном уровне 2 электрона.

В атоме гелия мы заменяем облако на 1 электрон:



Рис. 43: Модель Гелия

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (346)$$

$\hat{H}_1, \hat{H}_2$  - водородные операторы.  $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| = r_{12}$

$$\Psi_1(1)\Psi_2(2) \pm \Psi_2(1)\Psi_1(2) \quad (347)$$

-электрон - фермионы  $\Rightarrow$  антисимметричная по перестановке (но не будем торопиться)

Есть спин:

$$\Psi(1) = \Psi_{n1,l1,m1}(\vec{r}_1) \cdot \chi_{ms_1}(\sigma_1) \quad (348)$$

$\sigma_1$  - спиновая координата;

$\chi_{ms_1}$  - столбец вида:  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$   $\uparrow$ - спин вверх;  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$   $\uparrow$ - спин вниз

Спиновая часть волновой функции двухэлектронной подсистемы:

$$\chi(\sigma_1; \sigma_2) = \begin{cases} \uparrow_1 \uparrow_2 & \text{-симметричная} \\ \downarrow_1 \downarrow_2 & \text{-симметричная} \\ \uparrow_1 \downarrow_2 + \uparrow_2 \downarrow_1 & \text{-симметричная, (т.к. } \uparrow_1 \downarrow_2 \text{ - не симметричная)} \\ \uparrow_1 \downarrow_2 - \uparrow_2 \downarrow_1 & \text{-антисимметричная} \end{cases} \quad (349)$$

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 \quad (350)$$

$$S = 0 \longrightarrow M_s = 0; \quad S = 1 \longrightarrow M_s = +1; 0; -1 \quad (351)$$

В стационарном состоянии должны быть величины, которые точно определены:

$$M_S = m_{s1} + m_{s2} \quad (352)$$

$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  или  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  - собственные функции  $\chi_z$  соответствует  $m_s = \frac{1}{2}$ , поэтому

$$\chi(\sigma_1; \sigma_2) = \begin{cases} \uparrow_1 \uparrow_2 \Rightarrow M_s = 1 \\ \downarrow_1 \downarrow_2 \Rightarrow M_s = -1 \\ \uparrow_1 \downarrow_2 + \uparrow_2 \downarrow_1 \Rightarrow M_s = 0 \\ \uparrow_1 \downarrow_2 - \uparrow_2 \downarrow_1 \Rightarrow M_s = 0 \end{cases} \left. \begin{array}{l} \chi^s, S = 1 \\ \chi^A, S = 0 \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{-симметричная спиновая функция} \\ \text{-антисимметричная спиновая функция} \end{array} \quad (353)$$

У нас 4 спиновые части волновые функции для 2-х электронной системы

$$\Psi_{(A)} = \Psi_{A/S}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \cdot \chi_{S/A}(\sigma_1; \sigma_2) \quad (354)$$

$\Psi_{(A)}$ - антисимметричный (фермион).

## 11.4 Уровни энергии



Рис. 44: Уровни энергии

В атоме гелия знаем энергию в основном состоянии определяем по конфигурации: ( $n_1, n_2$  - квантовые число).

$$\delta E = \langle \frac{e^2}{r_{12}} \rangle = \int [\Psi_1^*(\vec{r}_1) \Psi_2^*(\vec{r}_2) \pm \Psi_2^*(\vec{r}_1) \Psi_1^*(\vec{r}_2)] \cdot \frac{e^2}{r_{12}} \cdot [\Psi_1(\vec{r}_1) \Psi_2(\vec{r}_2) \pm \Psi_2(\vec{r}_1) \Psi_1(\vec{r}_2)] d^3 r_1 d^3 r_2 \quad (355)$$

$$\delta E = \langle \frac{e^2}{r_{12}} \rangle_{(2)2}^{(1)1} + \langle \frac{e^2}{r_{12}} \rangle_{(1)2}^{(2)1} \pm \langle \frac{e^2}{r_{12}} \rangle_{(2)2}^{(1)1} \langle \frac{e^2}{r_{12}} \rangle_{(1)2}^{(2)1} \pm \langle \frac{e^2}{r_{12}} \rangle_{(2)1}^{(1)2} \langle \frac{e^2}{r_{12}} \rangle_{(1)1}^{(2)2} \sim zRy \quad (356)$$

$\langle \frac{e^2}{r_{12}} \rangle_{(2)2}^{(1)1} \langle \frac{e^2}{r_{12}} \rangle_{(1)2}^{(2)1}$  - обменный член - матричный элемент.

В формуле есть  $\pm$ .  $+- S = 0$ ;  $-- S = 1$ .

Чем больше  $z$  - тем больше электрон притягивается к ядру, тем меньше  $r$ .

Пример:

Стационарное состояние можно сгруппировать в термы (семейства), но только внутри конфигурации.

2 терма:  $S=0$  - синглет  $1s^2 \downarrow\uparrow$  - противоположны по принципу Паули

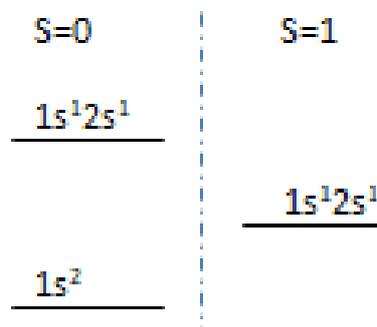


Рис. 45: Уровни энергии

## Лекция 12

### 12

### Тонкая структура

#### 12.1 Энергия термов

Есть многоэлектронный атом, имеется большое количество состояний с точно определённой энергией. Они создают группу, получаются уровни.

1) Учёт только электрон+ядро  $\Rightarrow$  конфигурация одноэлектронной волновой функции.

Полезное мнимоническое правило - правило Клечковского-Маделунга. Оно помогает найти конфигурацию с минимальной энергией.

$E_{min} \Rightarrow (n + l)_{min}$  (конфигурации с минимальной энергией соответствует конфигурация с минимальным  $(n + l)$ ).

Если  $(n + l)$  одинаковая, то  $E_{min} \Rightarrow n_{min}$

	Орбитальное квантовое число l					
	0	1	2	3	4	
Главное квантовое число n	1	1s				
	2	2s	2p			
	3	3s	3p	3d		
	4	4s	4p	4d	4f	
	5	5s	5p	5d	5f	5g
	6	6s	6p	6d	6f	6g
	7	7s	7p			

Сумма (n+l) диагональ: 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8

Рис. 46: Правило Клечковского-Маделунга

$N_{elmax} = 2(2l + 1)$  - максимальное число электронов.

2) Электрон-электронное взаимодействие можно учесть по теории возмущений. Конфигурации отстают друг от друга на  $z^2 Ry$ . Внутри каждой конфигурации есть термы. Расстояние между термами внутри конфигурации  $z Ry$ .

Внутри определённой конфигурации есть правило для нахождения  $E_{min}$  - правило Хунда. Для термов внутри конфигурации энергия задаётся набором квантовых

чисел  $L$  и  $S$

$$\vec{L} = \sum \vec{l}_i; \quad \vec{S} = \sum \vec{s}_i \quad (357)$$

Терм с минимальной энергией - это терм с максимальным значением  $S$ . Если несколько термов с равными  $S_{max}$ , то  $E_{min} \Rightarrow L_{max}$

$$E_{min} \Rightarrow S_{max} \longrightarrow E_{min} \Rightarrow L_{max} \quad (358)$$

**Пример:**

$$2p^1 3p^1 \quad (359)$$

Возможные термы:  $1+1=0,1,2 \Rightarrow S, P, D$

Спиновые квантовые числа:  $\frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 0; 1$

Мультиплетность:  $2s + 1$  - записывается сверху слева у терма.

Значит, всего 6 возможных пар термов:

$${}^{1,3}S; {}^{1,3}P; {}^{1,3}D \quad (360)$$

Наименьшая энергия у терма  ${}^3D$ , так как  $S_{max}$  и  $L_{max}$ .

## 12.2 Тонкая структура

3) Тонкая структура связана со спин-орбитальным взаимодействием. ( $L, S, J$ ). Посмотрев вооружённым глазом на терм, мы увидим более тонкую структуру: уровень внутри терма.

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad (361)$$

Характерные расстояния между уровнями в терме:  $\alpha^2 z^4 Ry$

$$\Delta E_{l,s} = \sum_{i=1}^k E_{n_i, l_i} \quad (362)$$

где  $k$  - количество электронов на последней, не до конца заполненной подоболочке в нашей рассматриваемой фиксированной конфигурации.

Внутри полностью заполненной оболочки, подоболочки:

$$L = 0; \quad S = 0; \quad J = 0 \quad (363)$$

Следовательно поправка от спин-орбитального взаимодействия равна нулю.

а) Если  $k < 2l + 1$ , то

$$\Delta E_{l,s} = \sum_{i=1}^k E_{n_i, l_i} = \xi_{n^k, l^k} \cdot \sum_{i=1}^k (\vec{l}_i \cdot \vec{s}_i) = \xi \frac{\vec{S}}{k} \sum_i \vec{l}_i = \xi \frac{(\vec{S} \cdot \vec{L})}{k} \quad (364)$$

где было использовано, что  $E_{min} \rightarrow S_{max}(\uparrow\uparrow\uparrow)$ ;  
 $\xi_{n^k,l^k}$  - константа, а  $n, l$ - квантовые числа последней подоболочки

$$\vec{S}_i = \frac{\vec{S}}{k} \quad (365)$$

$$\sum_i = \vec{L} \quad (366)$$

$$J^2 = L^2 + S^2 + 2(\vec{L} \cdot \vec{S}) \quad (367)$$

$$\frac{2(\vec{L} \cdot \vec{S})}{\hbar^2} = J(J+1) - L(L+1) - S(S+1) \quad (368)$$

$\xi > 0$  (из лекции про атом водорода).

Уровни отличаются только квантовым числом  $J$ .

Для термина  ${}^3D$  - D-триплет.

По правилу квантовых моментов:

$$\vec{2} + \vec{1} = 1, 2, 3 \quad (369)$$

Получим уровни:

$$D_{1,2,3} \quad E_{min} \rightarrow {}^3D_1 \quad (370)$$

Так как по формуле чем больше  $J$ , тем больше  $\Delta E$ .

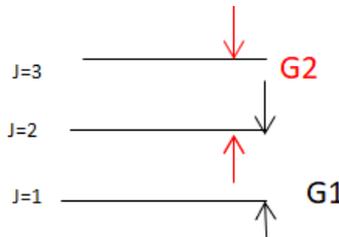


Рис. 47: Уровни в терме

$G2$  и  $G1$  - расстояние между уровнями.

$$\frac{G2}{G1} = \frac{3}{2} \quad (371)$$

б) Если  $k > 2l + 1 \Rightarrow$  введём дополнительные виртуальные электроны до заполнения оболочки.

$$k + \tilde{k} = 2(2l + 1) \Rightarrow \Delta E_{ls}(k) + \Delta E_{ls}(\tilde{k}) = 0 \quad (372)$$

Так как полностью заполненная оболочка не имеет спин-орбитального взаимодействия.

$\tilde{k} < 2l + 1$ , значит для  $\Delta E_{ls}(\tilde{k})$  верна формула из пункта а)

$$\Delta E_{ls}(k) = -\Delta E_{ls}(\tilde{k}) \quad (373)$$

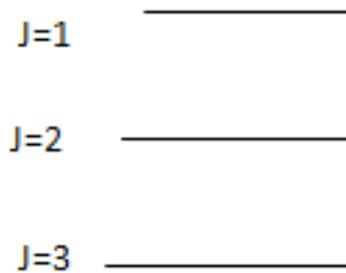


Рис. 48: Уровни в терме

Следовательно, здесь порядок уровней обратный:

Для конфигурации  $1s^2 2s^2 2p^5 3p^5$ : рис. (48)

Всё сформулированное - это правило интервалов Ландэ:

- 1) Если  $k < 2l + 1$ , то у нас прямой порядок уровней,  $E_{min}$  у уровня с минимальным  $J$ .
- 2) Если  $k > 2l + 1$ , то наоборот
- 3) Если  $k = 2l + 1$ , то  $\Delta E_{ls}(k) = -\Delta E_{ls}(k) = 0$

Когда сильное спин-орбитальное взаимодействие, мы можем говорить только о квантовых числах  $j$ .

Для  $N$  электронов:

$$\begin{aligned} &\text{Терм} \\ &\{j_1; j_2 \dots j_N\}_J \quad (374) \\ &\text{Уровень} \end{aligned}$$

$$\vec{J} = \sum_i^N \vec{j}_i \quad (375)$$

Существует  $z_{kr}$  - при таком заряде уже нельзя применять  $j - j$  связи для описания.

### 12.3 Переход между состояниями

Исследуем задачу о переходах между стационарными состояниями в квантовых системах.

Взаимодействие квантовой системы и электромагнитного излучения в полуклассическом приближении:

$$\widehat{H}_0 \Psi_n = E_n \Psi_n \quad - \text{знаем набор } \Psi_n \quad (376)$$

Поле описывается классически:

$$\vec{\mathcal{E}} = \vec{\varepsilon}_0 \cdot \cos(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (377)$$

$$\vec{H} = \vec{H}_0 \cdot \cos(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (378)$$

- монохроматические волны.

Вероятность нахождения фотона задаётся полями из уравнения Максвелла.

Воздействие классического поля на атомную систему можно представить в виде возмущения:

**Электрическое дипольное приближение:**

$$\vec{F}_e = e\vec{\varepsilon} + \frac{e}{c} \cdot [\vec{v} \times \vec{H}] \quad (379)$$

На наше поле атомная система не влияет.

1)  $\frac{v_e}{c} \ll 1$  - нерелятивистское приближение.

2)  $\lambda = \frac{2\pi}{\omega} \gg a_0$

Исходя из этого выбросим магнитное поле  $\vec{H}$  и выбросим пространственную часть  $\vec{k} \vec{r}$ , то есть:

$$\vec{\varepsilon} = \vec{\varepsilon}_0 \cdot \cos(\omega t) \quad (380)$$

$$\vec{F}_e = e\vec{\varepsilon} \quad (381)$$

Гамильтониан всей системы:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}(t) \quad (382)$$

- это нестационарный аналог теории возмущения. Верен только тогда, когда возмущение слабое.

Взаимодействие атома с полем - это взаимодействие электрического диполя с волной:

$$W = -(\vec{d} \vec{\varepsilon}) \quad (383)$$

где  $\vec{d}$  - дипольный момент.

$$\vec{d} = e \sum_{i=1}^N \vec{r}_i \quad (384)$$

$$\vec{d} = \int |\Psi_{n,l}(\vec{r})|^2 \vec{r} d^3r \quad (385)$$

- для одноэлектронной системы.

$$W \ll E_{at} = \frac{e^2}{a_0} \Rightarrow \varepsilon_0 \ll \frac{e}{a_0^2} \quad (386)$$

$E_{at}$  - энергия атомного взаимодействия.

Считаем, что теория возмущений применима:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum C_n(t) \Psi_n(\vec{r}) \cdot \exp(-\frac{i}{\hbar} E_n t) + \int C_E \Psi_E \cdot \exp(-\frac{i}{\hbar} E t) dE \quad (387)$$

$C_n$  - амплитуда вероятности найти электрон в момент времени  $t$  с энергией  $E_n = -\frac{z^2}{n^2} Ry$ .

$C_E$  - амплитуда вероятности найти электрон в момент времени  $t$  с энергией  $(E, E + dE)$ .

Напомним, что в атоме водорода дискретно-непрерывный спектр энергий.  
Рассмотрим дискретный спектр (непрерывный рассматривается по аналогии).

Коэффициенты меняются со временем:

Начальное условие в нашей задаче:

$$t = 0 \Rightarrow \Psi_i \Rightarrow C_n(t = 0) = \delta_{ni} \quad (388)$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (\widehat{H}_0 + \widehat{W})\Psi \quad (389)$$

$$i\hbar \sum_n \{\dot{C}_n(t) - C_n \frac{i}{\hbar} E_n\} \Psi_n \cdot \exp(-\frac{i}{\hbar} E_n t) = \sum_n C_n (\widehat{H}_0 + \widehat{W}) \Psi_n \cdot \exp(-\frac{i}{\hbar} E_n t) \quad (390)$$

$$i\hbar \sum_n \dot{C}_n(t) \Psi_n \cdot \exp(-\frac{i}{\hbar} E_n t) = \sum_n C_n \widehat{W} \Psi_n \cdot \exp(-\frac{i}{\hbar} E_n t) \quad | \cdot \langle \Psi_f | \quad (391)$$

$$\langle \Psi_n | \Psi_f \rangle = \delta_{fn} \Rightarrow \quad (392)$$

$$i\hbar \dot{C}_f(t) = \sum_n C_n \langle \Psi_f | \widehat{W} | \Psi_n \rangle \cdot \exp(\frac{i}{\hbar} (E_f - E_n)t) \quad (393)$$

$W_{fn}$ - матричный элемент перехода из состояния  $n$  в  $f$

$$i\hbar \dot{C}_f(t) = \sum_n C_n \langle \Psi_f | \widehat{W} | \Psi_n \rangle \cdot \exp(\frac{i}{\hbar} (E_f - E_n)t) \quad (394)$$

Переход возможен только если:

$$W_{fi} = \langle \Psi_i | W | \Psi_f \rangle \neq 0 \quad (395)$$

Если  $= 0$ , то переход запрещён в рамках нашего приближения.

$$\omega_{fn} = \frac{E_f - E_n}{\hbar} \quad (396)$$

Для того, чтобы переход шёл эффективно, необходимо  $\omega = \omega_{fi}$

## Лекция 13

### 13 Дипольное приближение. Правила отбора

#### 13.1 Переход между состояниями

В продолжении предыдущей лекции:

$$i\hbar\dot{C}_f(t) = \sum_n C_n(t)W_{fn} \cdot \exp(i\omega_{fn}t) \quad (397)$$

$W_{fn}$  - матричный элемент оператора взаимодействия.

Будем считать, что:

$$C_f(t) = C_f^{(0)} + C_f^{(1)} + \dots \quad (398)$$

Работаем в первом порядке приближения. Аналогично и с  $C_n$

$$i\hbar(\dot{C}_f^{(0)} + \dot{C}_f^{(1)} + \dots) = \sum_n (C_n^{(0)} + C_n^{(1)} + \dots) \cdot W_{fn} \cdot \exp(i\omega_{fn}t) \quad (399)$$

Мы считаем, что существует исходное состояние:

$$C_n^{t=0} = \delta_{ni} \quad C_f^{(t=0)} = C_f^{(0)} = 0 \quad (400)$$

Тогда подставляя в уравнение, получим:

$$i\hbar\dot{C}_f^{(1)} = W_{fi} \cdot \exp(i\omega_{fi}t) \quad (401)$$

$$C_f(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t W_{fi}(t') \cdot \exp(i\omega_{fi}t') dt' = \frac{i}{\hbar} d_{fi} \varepsilon_0 \int_0^t \cos(\omega t) \cdot \exp(i\omega_{fi}t) dt \quad (402)$$

Частота  $\omega$  - управляемая частота,  $\omega_{fi}$  - характеристика атомной системы.

$d_{fi}$  - матричный элемент дипольного момента.

$$W = -(\vec{d} \cdot \vec{\varepsilon}) \quad (403)$$

$$\cos(\omega t) = \frac{1}{2}(\exp(i\omega t) + \exp(-i\omega t)) \quad (404)$$

Тогда после подстановки:

$$\frac{i}{\hbar} d_{fi} \varepsilon_0 \int_0^t \cos(\omega t) \cdot \exp(i\omega_{fi}t) dt = \frac{id_{fi} \varepsilon_0}{2\hbar} \cdot \left\{ \frac{\exp(i(\omega + \omega_{fi})t)}{i(\omega + \omega_{fi})} + \frac{\exp(i(\omega_{fi} - \omega)t)}{i(\omega_{fi} - \omega)} \right\} \Big|_0^t \quad (405)$$

Воспользуемся приближением медленно вращающейся волны:

Будем считать, что

$$\omega_{fi} - \omega = \Delta\omega = \Delta \ll \omega, \omega_{fi} \quad (406)$$

где  $\Delta\omega$  - модуль отстройки.

Тогда можно пренебречь первым слагаемым:

$$\frac{id_{fi}\varepsilon_0}{2\hbar} \cdot \left\{ \frac{\exp(i\Delta t) - 1}{i\Delta} \right\} \quad | \cdot \frac{\exp\left(\frac{-i\Delta t}{2}\right)}{\exp\left(\frac{-i\Delta t}{2}\right)} \quad (407)$$

Напомним, что нас интересует, не коэффициент  $C_f$ , а вероятность перехода:

$$P_{fi} = \frac{d_{fi}^2 \cdot \varepsilon_0^2 \cdot \sin^2\left(\frac{\Delta t}{2}\right)}{\hbar^2 \Delta^2} \quad (408)$$

Необходимо проверить не выходим ли мы за пределы применимости :  $P_{fi} \ll 1$ . Но мы рассматриваем  $\Delta \rightarrow 0$ . Мы не интересуемся малыми моментами времени (сразу же после включения).

Тогда  $\Delta t_{iter} \gg 1$ .

$$P_{fi} = \frac{d_{fi}^2 \cdot \varepsilon_0^2 \cdot \sin^2\left(\frac{\Delta t}{2}\right)t}{4\hbar^2 \cdot \left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 t} \quad (409)$$

При  $t \rightarrow \infty \Rightarrow$  стремится к  $\pi\delta\left(\frac{\Delta}{2}\right)$

$$P_{fi} \sim d_{fi}^2 \varepsilon_0^2 \cdot \delta(E_f - E_i - \hbar\omega_{fi}) \quad (410)$$

$P_{fi}$  - вероятность перехода в единицу времени.

Пришли к тому, что обосновали первый постулат Бора.

Но нет же монохроматических излучений!

$$I = \frac{c\varepsilon_0^2}{8\pi} \Rightarrow P_{fi} \sim d_{fi}^2 \int I_\omega \delta(\omega_{fi} - \omega) d\omega \sim d_{fi}^2 I_{\omega_{fi}} \quad (411)$$

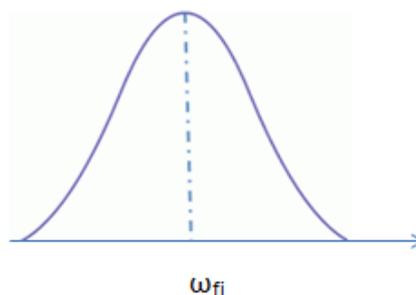


Рис. 49: Спектр излучения

$$P_{fi} = B_{fi} I_{\omega_{fi}} \quad (412)$$

где  $B_{fi}$  - коэффициент Эйнштейна.

Если учитывать все коэффициенты в наших предыдущих формулах, то

$$B_{fi} = \frac{4\pi^2 d_{fi}^2}{c\hbar^2} \quad (413)$$

Но у нас же  $d_{fi}$  - матричный элемент z проекции. Поэтому из-за равноправия направлений:

$$B_{fi} = \frac{4\pi^2 d_{fi}^2}{3c\hbar^2} \quad (414)$$

где  $d_{fi}$  - уже не проекция.

### Проблемы:

- 1) Многофотонные процессы
- 2) Система не описывается электрически дипольным приближением (магнитные, квадрупольные и другие составляющие)

Когда  $d_{fi} \neq 0$ ?

## 13.2 Правила отбора в различных квантовых системах

### 13.2.1 1D - гармонический осциллятор

Когда  $x_{mn} \neq 0$

$$\Psi_n \cong \exp\left(-\frac{1}{2}\left[\frac{x}{x_0}\right]^2\right) \cdot H_n\left(\frac{x}{x_0}\right) \quad (415)$$

$$\rightarrow \langle \Psi_m | x | \Psi_n \rangle = \int H_m(\xi) \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right) \exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right) \cdot \xi \cdot H_n(\xi) d\xi \quad (416)$$

$$\langle \Psi_m | x | \Psi_n \rangle = \int H_m(\xi) \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right) \exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right) \cdot \{nH_{n-1} + \frac{1}{2}H_{n+1}\} d\xi \quad (417)$$

Полином Эрмита равен нулю, если  $m = n \pm 1$  Разрешены однофотонные процессы

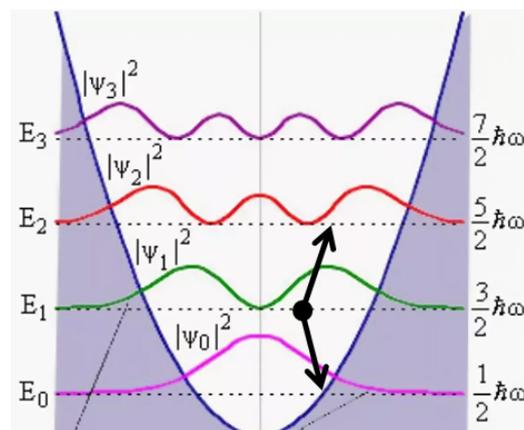


Рис. 50: Переходы осциллятора

с переходом  $\uparrow$  или  $\downarrow$  на один уровень.

### 13.2.2 [H]-ион

$$\langle n; l; m_l | \begin{Bmatrix} x \\ y \\ z \end{Bmatrix} | \tilde{n}; \tilde{l}; \tilde{m}_l \rangle \quad (418)$$

$$d_{fi} = d_{fi}^{(r)} \cdot d_{fi}^{(\theta)} \cdot d_{fi}^{(\varphi)} \quad (419)$$

Следующая задача: получить правила отбора в [H]-ионе, атоме Гелия, в одномерной квантовой точке.

Анализируем:

$$d_{fi}^{(\varphi)} \rightarrow \int_0^{2\pi} \exp(-im_l\varphi) \begin{Bmatrix} x \\ y \\ z \end{Bmatrix} \exp(+i\tilde{m}_l\varphi) d\varphi \quad (420)$$

$$x \sim \cos\varphi \sim e^{i\varphi} + e^{-i\varphi} \quad (421)$$

$$y \sim \sin\varphi \sim e^{i\varphi} - e^{-i\varphi} \quad (422)$$

$$z \sim 1 \sim e^{i \cdot 0 \cdot \varphi} \quad (423)$$

Чтобы матричный элемент был отличен от нуля, необходимо чтобы хотя бы одно слагаемое  $\neq 0$ .

$$\int_0^{2\pi} e^{i(\tilde{m}_l - m_l \pm 1)\varphi} d\varphi \quad (424)$$

Данный интеграл обращается в ноль всегда, кроме случая, когда

$$\tilde{m}_l = m_l \pm 1 \quad (425)$$

С  $z$  компонентой:

$$\int_0^{2\pi} e^{i(\tilde{m}_l - m_l)\varphi} d\varphi \quad (426)$$

$$\tilde{m}_l = m_l \quad (427)$$

$$\Delta m_l = 0, \pm 10 \quad (428)$$

С  $\theta$  частью после долгих мучений получим:

$$\Delta l = \pm 1 \quad (429)$$

Чтобы переход был возможен, необходимо, чтобы правила выполнялись и для  $\Delta l$ ,  $\Delta m_l$ .

С  $r$  частью мы ничего не получим.

Пусть есть двухуровневая система:

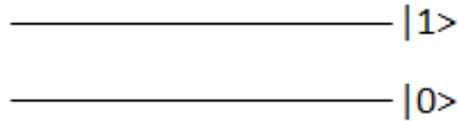


Рис. 51: Двухуровневая система

$$\Psi = \sum_n \Psi_n \simeq \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \quad (430)$$

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad (431)$$

Состояние системы можно представить как векторы в трёх плоскостях рис.52:

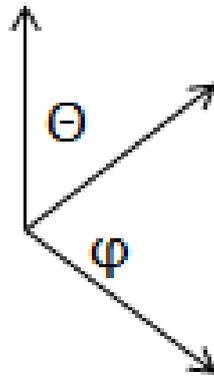


Рис. 52: Система

Пусть поле плавно нарастает рис.53. Огибающая нам известна.  $\omega$  известна.

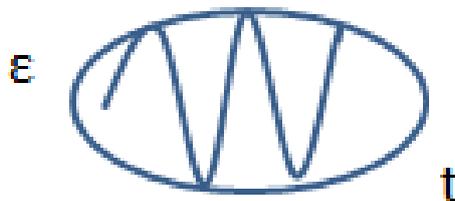


Рис. 53: Нарастание поля

Необходимо определить условия, когда за время действия импульс системы перейдёт из 0 в 1.

Переход из 0 в 1 эквивалентен перевороту вектора, изображающего наше состояние (вектор Блоха).

(Найти условия, при которых мы можем совершить операцию НОД над одним квантовым битом).

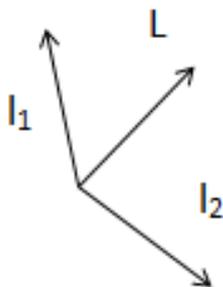


Рис. 54: Вектор L

Перейдём к многоэлектронным атомам.  
Разрешённые состояния можно группировать:  
конфигурация → терм → уровень

1) Переходы между какими конфигурациями возможны?

Правило Лапорта: чётность при переходе должна меняться.  
Возможны переходы только между конфигурациями разной чётности:

$$r = \sum_{i=1}^N l_i \quad (432)$$

где N - количество электронов в конфигурации.

Если r чётное, то состояние чётное, если r нечётное, то состояние нечётное.

В одноэлектронном мы как раз это и получили:  $\Delta l = \pm 1$ .

В многоэлектронном:

$$d_{fi} = \int \Psi_{f^*}(e\vec{r}) \Psi_i d^3r \quad (433)$$

$e\vec{r}$  - нечётная относительно нуля.

$\Psi_i$  - радиальная часть содержит  $(r)^l$  и l определяет симметрию

$$\Psi_{f^*}^{H, \chi}(e\vec{r}) \Psi_i^{H, \chi} d^3r \quad (434)$$

$$\rho = 0$$

2) Между термами ? (LS)

Без доказательства:  $\Delta L = \pm 1; 0$

Но момент количества движения же должен уноситься, откуда тогда 0? Это связано просто с поворотом вектора, без изменения его длины.

В оператор W не входит спиновая часть →  $\Delta m_s = 0$  в одноэлектронном атоме.  
В многоэлектронном атоме действует правило интерференционного запрета:

$\Delta S = 0$ ;  $\Delta J = 0; \pm 1$ , но переходы  $0 \rightleftharpoons 0$  запрещены. (Идея с поворотом вектора уже не проходит).

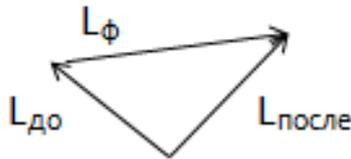


Рис. 55: Поворот вектора

Спец.задача: в атоме Гелия  $\Delta S = 0$ .

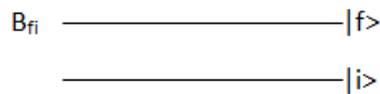


Рис. 56: Уровни

Коэффициенты Эйнштейна:

1) Вынужденные

$$P_{fi} = B_{fi} I \omega_{fi} \quad (435)$$

2) Спонтанные

$A_{fi}$  - следуют из нулевого начала термодинамики (переход в состояние с наименьшей энергией).

## Лекция 14

### 14 Квантовое электромагнитное поле

#### 14.1 Моды электромагнитного осциллятора

У нас есть куб, в котором квантовое электромагнитное поле:

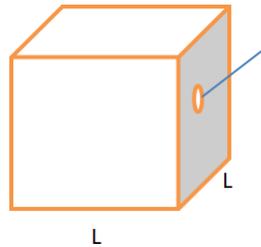


Рис. 57: Куб

Кулоновская калибровка (не является Лоренц инвариантной, но мы в нерелятивистике):

$$\varphi \equiv 0 \quad \text{div } \vec{A} = 0 \quad (436)$$

Нет токов и нет зарядов, тогда уравнения Максвелла имеют вид:

$$\vec{\epsilon} = -\frac{1}{c} \cdot \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad (437)$$

$$\vec{H} = \text{rot } \vec{A} = [\vec{\nabla} \times \vec{A}] \quad (438)$$

Внутри куба могут существовать только стоячие волны.

Характеристика моды :  $\vec{k}, \omega_k$ .

В одномерном случае основная мода  $|\cap|$ .

$$\vec{A} = \sum_{k;n} \vec{e}_k \cdot a_k(t) \cos(\vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (439)$$

где n - сумма по всем поляризациям,  $a_k$  - амплитуда k моды.

$$\vec{\epsilon} = -\frac{1}{c} \sum_k \vec{e}_k \cdot \dot{a}_k \cos(\vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (440)$$

$$\vec{H} = - \sum_k [\vec{k} \times \vec{e}_k] \cdot \sin(\vec{k} \cdot \vec{r}) \cdot a_k \quad (441)$$

Пусть  $\epsilon_k = -\frac{\dot{a}}{c}$ . Гамильтониан  $H$  задаётся следующим образом:

$$H = \int_{L^3} \frac{\vec{\epsilon}^2 + \vec{H}^2}{8\pi} d^3r \quad (442)$$

$$\int \cos^2(kr)d^3r = \int \sin^2(kr)d^3r = \frac{1}{2} \quad (443)$$

Если  $k \neq k'$ , то

$$\int \cos(kr) \cdot \cos(k'r)d^3r = 0 \quad (444)$$

$$H = \frac{L^3}{8\pi} \sum_k (\varepsilon_k^2 + k^2 a_k^2) \cdot \frac{1}{2} \quad (445)$$

Функция Гамильтона представима в виде разложения по модам. Переходим к квантовой механике:

$$\hat{H}_{field} = \frac{L^3}{8\pi} \sum_k (\hat{\varepsilon}_k^2 + k^2 \hat{a}_k^2) \cdot \frac{1}{2} \quad (446)$$

сумма гамильтонианов одномерных гармонических осцилляторов.

$$\hat{H}_{осц} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (447)$$

Перепишем в безразмерных координатах:

$$\hat{\tilde{x}} = \frac{\hat{x}}{x_0}; \quad \hat{\tilde{p}} = \frac{\hat{p}}{p_0} \quad (448)$$

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}; \quad p_0 = \sqrt{\hbar m\omega} \quad (449)$$

$$\hat{H}_k = (\hat{\tilde{\varepsilon}}_k^2 + k^2 \hat{\tilde{a}}_k^2) \cdot \frac{1}{2} \quad (450)$$

$$\tilde{\varepsilon} = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_*}; \quad \tilde{a} = \frac{a}{a_*} \quad (451)$$

Характерная энергия -  $\hbar\omega$ . Скажем, что самая маленькая энергия моды  $\frac{\hbar\omega}{2}$ .

$$L^3 \frac{\varepsilon_*^2}{8\pi} = \frac{\hbar\omega_k}{2} \Rightarrow \varepsilon_* = \sqrt{\frac{4\pi\hbar\omega_k}{L^3}} \quad (452)$$

$$a_* = k\varepsilon_* \quad (453)$$

$$\hat{H}_k = \hbar\omega_k (\hat{\tilde{\varepsilon}}_k^2 + \hat{\tilde{a}}_k^2) \quad (454)$$

$$\hat{H}_{осц} = \hbar\omega (\hat{\tilde{x}}^2 + \hat{\tilde{p}}^2) \quad (455)$$

Должно быть верно волновое уравнение:

$$\nabla^2 \vec{A} - \frac{1}{c^2} \cdot \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} = 0 \quad (456)$$

Волновое уравнение для k-ой моды:

$$\ddot{a}_k + k^2 a_k = 0 \quad (457)$$

- уравнение движения для одномерного классического осциллятора.  
Должно действовать одно и тоже коммутационное соотношение:

$$[\hat{x}; \hat{p}] \sim -i \quad (458)$$

$$[\hat{a}; \hat{\varepsilon}] \sim -i \quad (459)$$

В случае электромагнитного поля напряжённость - это наблюдаемая величина.  
 $\vec{A}$  - ничего не сообщает явно, поэтому договорились  $a_k \rightarrow p$ .

$$\hat{H}_k \Phi_{nk}(\tilde{\varepsilon}) = E_{nk} \Phi_{nk}(\tilde{\varepsilon}) \quad (460)$$

$$E_{nk} = \hbar\omega_k(n_k + \frac{1}{2}) \quad (461)$$

$n_k$  - число порций возбуждения в  $k$ -ой моде, или число фотонов.

Таким образом, мы пришли к определению фотона: фотон - число возбуждений.

$\Phi_{nk}$  - с точностью до нормировки - полином Эрмита степени  $n$  к на асимптотическую функцию.

## 14.2 Классическое электромагнитное поле

В стационарном состоянии:

$$\langle \tilde{\varepsilon} \rangle_{nk} = 0 \quad (462)$$

Мы пришли раньше к выводу, что свет - это и не поток частиц, и не волна.  
Классический свет - нестационарное состояние.

$$\varphi = \sum_{nk} C_{nk} \Phi_{nk}(\tilde{\varepsilon}) \quad (463)$$

$\langle n_k \rangle \gg 1$

$$\langle E_{nk} \rangle = \hbar\omega(\langle n_k \rangle + \frac{1}{2}) \quad (464)$$

$$\varphi \sim \exp(\frac{i}{\hbar} p_0 x) \cdot \exp(-\frac{1}{2}(\frac{x}{x_0})^2) \quad (465)$$

Утверждается, что эта функция - когерентное состояние.

$$|C_{nk}|^2 - \text{распределение Пуассона} \quad (466)$$

$$\hat{b}_k = \tilde{x} + i\tilde{p}; \quad \hat{b}_k^+ = \tilde{x} - i\tilde{p} \quad (467)$$

$$\hat{b}|\varphi\rangle = \beta|\varphi\rangle \quad (468)$$

$$\delta_{nk} = \frac{\sqrt{D_{nk}}}{\langle n_k \rangle} \quad (469)$$

$$D_0(n_k) = \langle n_k \rangle_k \quad (470)$$

Рассмотрим  $n_k = 0$ .

$$\hat{b}_k|\Phi_{nk=0}\rangle = 0 - \text{вакуумное состояние} \quad (471)$$

Но в этом вакууме есть энергия:  $E = \sum_k \frac{\hbar\omega_k}{2}$ .

Атом взаимодействует с вакуумным квантовым полем.

Мы рассматривали двухуровневую систему, и в ней у нас не выполнялось нулевое начало термодинамики (время жизни атома на верхнем состоянии было бесконечным). Так оно и не выполняется, так как атом неизолированный, находится в вакуумном поле.  $A_{fi}$  - коэффициент спонтанного перехода.

Взаимодействие квантового электромагнитного поля с атомом:

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{ат}} + \hat{H}_{\text{field}} + \hat{W} \quad (472)$$

где  $\hat{W} = -(\vec{d} \vec{\varepsilon})$  - взаимодействие между атомом и полем.

$$C_{fi} \sim d_{fi}^{(at)} \langle \Phi_{nk}^{in} | \hat{\varepsilon}_k | \Phi_{nk}^{fin} \rangle \int_0^t dt' \exp[(-\omega_{fi}^{at} + \omega_k - \omega_{k'})t] \quad (473)$$

$C_{fi}$  - амплитуда перехода.

Правила отбора для волновой части:

$$n_{k'} = n_k \pm 1 \quad (474)$$

Возможен переход с изменением числа фотонов в одной из мод на единицу.

$$\langle \Phi_{nk}^{in} | \hat{\varepsilon}_k | \Phi_{nk}^{fin} \rangle \sim n_k \quad (475)$$

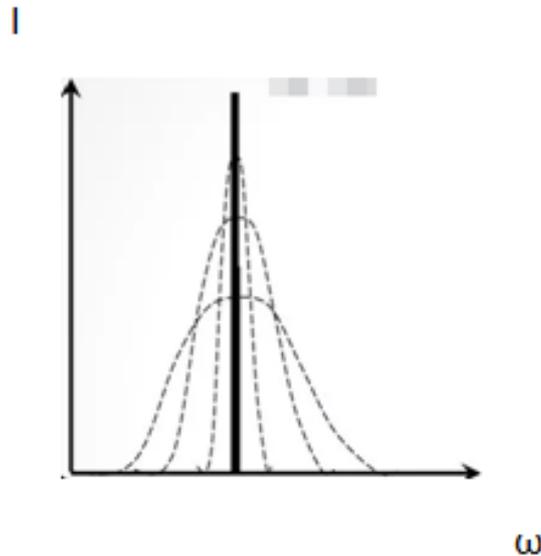


Рис. 58: Спектры атома

Поэтому переход между 1000 и 1001 более вероятный, чем между 1 и 2. Отличие между веществом и фотоном - разные классификации частиц (бозоны и фермионы).

Переход осуществляется, если  $\omega_{fi}^{(at)} \approx \omega_k$ .  
Если размер маленький, то нет моды, в которой возбуждённый атом излучает.

Парадокс: чтобы изолировать атом необходимо не уносить его в межзвёздное пространство. Чтобы атом в возбуждённом состоянии жил, его надо поместить в очень маленький объём (атомные полости) и не будет  $\omega_k \approx \omega_{fi}$ .

Спец. задача: посчитать  $A_{fi}$ :

$$A_{fi} = \frac{\hbar \omega_{fi}^3}{\pi^2 c^2} \cdot B_{fi} \quad (476)$$

Спонтанные переходы приводят к тому, что  $\tau \neq \infty$

$$\Delta E \cdot \tau \geq \hbar \quad (477)$$

На практике спектры атома у нас изображены пунктиром (Лоренцева кривая), на рис.58. В теории это дельта функция.

### 14.3 Эффект Казимира

Если мы возьмём и поместим на небольшом расстоянии друг от друга две незаряженные плоскости в вакууме, то они будут между собой взаимодействовать, так как вакуум внутри и снаружи разный рис.(59).

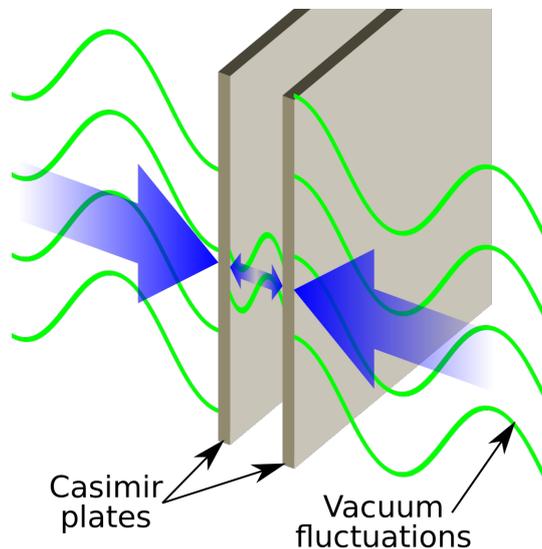


Рис. 59: Эффект Казимира

Сила притяжения этих плоскостей будет порядка:

$$F_{\text{прит}} \sim 10^{-2} \text{дин} \quad (478)$$

Существует также динамический эффект Казимира. Необходимо дёргать одну из пластин со скоростью, близкой скорости света. Тем самым меняются граничные условия. В этом случае возможно рождение пар скореллированных фотонов.

## Лекция 15

### 15 Лэмбовский сдвиг. Атом в магнитном поле

#### 15.1 Эффект Лэмба-Резерфорда

Электромагнитное поле - квантовый объект.

$$A_{fi} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^2} B_{fi} \sim \omega_{fi}^3 d_{fi}^2 \Sigma \quad (479)$$

Естественная ширина перехода задаётся  $\omega_{fi}$ .

В нашем курсе атомной физики:  $\omega_{fi} \ll \omega_{at} = \frac{Ry}{\hbar}$ .

$2^2S_{\frac{1}{2}}$  и  $2^2P_{\frac{1}{2}}$  имеют одинаковую энергию (по формуле Дирака).

В атоме водорода вырождение снимается из-за взаимодействия с вакуумом.

В квазиклассике учёт размеров ядра : с помощью теории возмущений, через щелочной атом, например, натрия.

Характерный атомный масштаб: боровский радиус ( $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$ )

Характерный ядерный масштаб:  $r_e = \frac{e^2}{mc^2} = \alpha^2 a_0$

Но электрон же не может излучить фотон? Действует правило. Если что-то запрещено, то это можно сделать, но очень очень быстро. Если  $\tau \Delta E \leq \hbar$ .

Электрон фонит (колеблется).

$$\langle \bar{\xi}_i \rangle = 0 \quad (480)$$

- смещение, связанное с дрожанием.

$$U(\vec{r} + \vec{\xi}) - U(\vec{r}) = \Delta U \quad (481)$$

$\Delta U$  - поправка к потенциальной энергии, связанная с дрожанием. Её и вставляем в теорию возмущений.

$$\xi_i \cdot \frac{\partial U}{\partial x_i} + \frac{1}{2} \xi_i \xi_j \cdot \frac{\partial^2 U}{\partial x_i \partial x_j} \quad (482)$$

i-ось,  $x_i$  - координата вдоль i-оси.

Все направления равноправны:

$$0 + \frac{1}{6} \bar{\xi}^2 \cdot \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \quad (483)$$

U - кулоновский потенциал задаётся уравнением Пуассона

$$\Delta \varphi = -4\pi \rho_{\text{ядра}} = -4\pi e z \cdot \delta(\vec{r}') \quad (484)$$

Размытие ядра мы игнорируем. Скажем, что

$$m \ddot{\xi} \sim e \epsilon \quad (485)$$

Разложим в ряды Фурье:

$$\xi \sim e^{i\omega_k t} \cdot \xi_k \quad (486)$$

$$\varepsilon \sim e^{i\omega_k t} \cdot \varepsilon_k \quad (487)$$

$$\bar{\varepsilon}_k = \varepsilon_* = \sqrt{\frac{4\pi\hbar\omega_k}{L^3}} \quad (488)$$

$$\bar{\xi}^2 \sim \sum \frac{1}{\omega_k^3} \Rightarrow \int \frac{d^3k}{\omega_k^3} \quad (489)$$

Используя дисперсионное соотношение и выражение для элемента объёма в сферических координатах:

$$\int \frac{d^3k}{\omega_k^3} \Rightarrow \frac{2}{\pi} \int \frac{d\omega}{\omega} \cdot \alpha \cdot \left(\frac{\hbar}{mc}\right)^2 \quad (490)$$

где  $\left(\frac{\hbar}{mc}\right)^2$  - комптоновская длина волны:  $\lambda_k = \alpha a_0$

$\int \frac{d\omega}{\omega}$  - расходится.

Необходимо что-то делать с расходимостью интеграла:

$$\hbar\omega_{max} = mc^2 = \frac{2Ry}{\alpha^2} \quad (491)$$

$$\hbar\omega_{min} = \frac{z^2 Ry}{n^2} \quad (492)$$

Максимальная длина волны - бессмысленно учитывать длины волн больше длины орбиты.

$$\frac{\omega_{max}}{\omega_{min}} = \frac{2n^2}{\alpha^2 z^2} \quad (493)$$

Тогда и интеграл мы будем считать уже не в бесконечных пределах, а в пределах  $\int_{\omega_{min}}^{\omega_{max}}$

## 15.2 Лэмбовская поправка

$$\Delta E_{n,l}^L = \langle n, l | \Delta U | n, l \rangle \rightarrow \int |\Psi_{n,l}|^2 \delta(\vec{r}) d^3r \quad (494)$$

$\Delta E_{n,l}^L$  отлична от нуля, если  $l = 0$ , поэтому индекс  $l$  можно убрать.

$$\Delta E_n^L = \frac{8}{3\pi} \cdot \frac{\alpha^3 z^4 Ry}{n^3} \ln\left(\frac{\omega_{max}}{\omega_{min}}\right) \quad (495)$$

Рисунок 60: Спонтанный переход должен происходить на частоте 1049 МГц - подавленный. А как тогда ещё можно пронаблюдать эту поправку?

Из уровня 1S производим вынужденные переходы на 2P и на 2S. Ставим детекторы на приём излучения с 1S и с 2S. С уровня 2P происходят спонтанные переходы

обратно на 1S, а с уровня 2S они подавлены. Тогда прикладываем микроволновое излучение, и возрастает поток частиц с уровня 2S.



Рис. 60: Поправка к уровню

Мы опустились очень низко по разрешённым энергетическим состояниям: порядка 100 МГц

### 15.3 Взаимодействие атома с магнитным полем

Электрон движется по круговой орбите вокруг ядра:  
Уравнение движения:

$$F_{\text{кул}} = F_{\text{цб}} \quad (496)$$

$$\ddot{\vec{r}} + \omega_n^2 \vec{r} = \frac{e}{c} [\dot{\vec{r}}; \vec{H}] \quad (497)$$

Если магнитное поле не равно нулю:

$$\ddot{x} + \omega_n^2 x = 2\Omega_L \dot{y} \quad (498)$$

$$\ddot{y} + \omega_n^2 y = -2\Omega_L \dot{x} \quad (499)$$

$$\ddot{z} + \omega_n^2 z = 0 \quad (500)$$

По оси z происходят колебания с частотой  $\omega_n$ ; по другим осям  $\omega_n \pm \Omega_L$

$$\Omega_L = \frac{e|\vec{H}|}{2mc} \hbar = \mu_0 |\vec{H}| \quad (501)$$

У нас разная поляризация у трёх компонент

$$E_{\vec{H}} = -(\vec{\mu} \cdot \vec{H}) \quad (502)$$

В квантовой теории:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \mu_0 |\vec{H}| \quad (503)$$

$$\hat{L}_z \longrightarrow |\vec{H}|$$

$$\hat{\mu}_z = \frac{e}{2mc} \quad (504)$$

Поправка для электрона, не учитывая его спин:

$$\Psi = \Phi(r, \theta) \cdot e^{im_l \varphi} \quad (505)$$



Рис. 61: Расщепление

$\Psi$  - является собственной функцией операторов  $\hat{L}_z$  и  $\hat{H}_0$

$$E_n = E_n^{(0)} - \mu_0 |\vec{H}| m_l \quad (506)$$

Отсюда и название для магнитного квантового числа  $m_l$

Например, если  $l = 1$ , тогда  $m_l = -1; 0; 1$

Уровень разбивается на 3 части.

Кажется, что для  $l = 2$ , уровень должен разбиваться на 5, но не забываем про правила отбора:  $\Delta m_l = 0; \pm 1$ .

То есть и для больших  $l$  разбиение будет всё равно на 3 уровня. Получили так называемые нормальный эффект Зеймана, но на практике его очень сложно добиться, так как расщепление обычно более сложное. Связано это более сложное расщепление со спином.

Взаимодействие электрона с учётом спина в теории расщепления можно разбить на две группы:

### 15.3.1 Взаимодействие с сильным магнитным полем

$$\Delta E_{ls} \sim \alpha^2 z^4 Ry = \mu_0 |\vec{H}_{кр}| \quad (507)$$

$\Delta E_{ls}$  - энергия спин-орбитального взаимодействия.

$$|\vec{H}| \geq |\vec{H}_{кр}| \quad - \text{сильное поле} \quad (508)$$

Если поле сильное, то энергию спин-орбитального взаимодействия можно не учитывать. Учитываем как возмущение:

$$\Delta E_H = \langle {}^{n,l}_{L,S} | - (\vec{\mu} \cdot \vec{H}) | {}^{n,l}_{L,S} \rangle \quad (509)$$

$$\vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S = \mu_0 (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z) \quad (510)$$

Далее операторы будут безразмерными

$$\Delta E_H = \mu_0 |\vec{H}| (M_L + 2M_S) \quad (511)$$

p-дублет:  $L = 1, S = \frac{1}{2}$

$$M_L = +1; 0; -1 \quad 2M_S = +1; -1 \quad (512)$$

$$M_L + 2M_S = -2; -1; 0; 1; 2 \quad (513)$$

Значит терм расщепляется на 5 компонент. Но нам необходимо опять не забыть про правила отбора:

$$\Delta S = 0 \longrightarrow \Delta M_s = 0 \quad (514)$$

Следовательно наш уровень также разбивается на 3

### 15.3.2 Взаимодействие со слабым магнитным полем

$$|\vec{H}| \leq |\vec{H}_{кр}| \quad - \text{ слабое поле} \quad (515)$$

Здесь мы уже должны учитывать спин-орбитальное взаимодействие. Разговор об этом на следующей лекции.

## Лекция 16

### 16 Физика молекул

#### 16.1 Взаимодействие атома с магнитным полем

##### 16.1.1 Взаимодействие со слабым магнитным полем

$$|\vec{H}| < |\vec{H}_{кр}| \quad - \text{слабое поле} \quad (516)$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{U}_{ls} + \hat{U}_M \quad (517)$$

Стационарное состояние описывается  $|L; S; J; M_J\rangle$

$$\hat{\mu}_S = -2\mu_0\hat{S} \quad (518)$$

Далее все моменты пишутся в безразмерном виде.

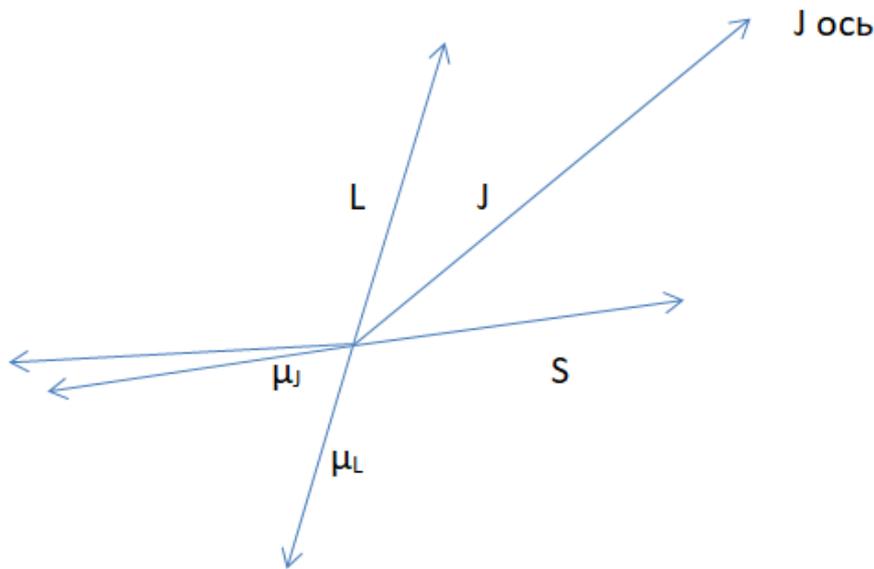


Рис. 62: Векторы различных величин

$\vec{\mu}_J$  находится по некоторым углом к J оси (из-за нарушения пропорции, из-за 2 в формуле (518))

Частота вращения векторов  $\mu_s$  и  $\mu_J$  задаётся  $\hat{U}_{ls}$  - энергией спин-орбитального взаимодействия.

$$\Omega \sim \alpha^2 Ry \simeq \alpha^2 \omega_{at} \quad 10^{12}-10^{12} \text{Гц} \quad (519)$$

Вращение  $\mu_J$  даёт нам эффективный магнитный момент:  $\mu_{eff}$  - проекция  $\mu_J$  на ось J.

$$\hat{\mu}_S = -2\mu_0\hat{S} \longrightarrow \vec{\mu}_{eff} = -g\mu_0\vec{J} \quad (520)$$

где  $g$  - фактор Ландэ

$$g = -\frac{1}{\mu_0} \cdot \frac{(\vec{\mu}_{eff} \cdot \vec{J})}{|\vec{J}|^2} = -\frac{1}{\mu_0} \cdot \frac{(\vec{\mu}_J \cdot \vec{J})}{|\vec{J}|^2} \quad (521)$$

$$\vec{\mu}_J = \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S = -\mu_0(\vec{L} + 2\vec{S}) \quad (522)$$

$$\vec{L} + \vec{S} = \vec{J} \quad (523)$$

$$\vec{\mu}_J = -\mu_0(\vec{J} + \vec{S}) \quad (524)$$

$$g = \frac{-\mu_0}{-\mu_0} \cdot \frac{(\vec{J} + \vec{S}; \vec{J})}{|\vec{J}|^2} = 1 + \frac{(\vec{S} \cdot \vec{J})}{|\vec{J}|^2} \quad (525)$$

$$\vec{L} = \vec{J} - \vec{S} \Rightarrow |\vec{L}|^2 = |\vec{J}|^2 + |\vec{S}|^2 - 2(\vec{J} \cdot \vec{S}) \quad (526)$$

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (527)$$

Нельзя говорить о термах, говорим об уровнях:

Если  $\vec{H} = \vec{0}$ , то у нас 2 разрешённых перехода в электрически дипольном приближении.

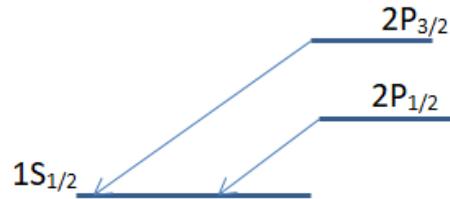


Рис. 63: Разрешённые переходы

Если же  $\vec{H} \neq \vec{0}$ , то

$$\Delta E_H = \langle L; S; J; M_J | \{ -(\widehat{\mu}_{eff} \vec{H}) \} | L; S; J; M_J \rangle = \mu_0 g M_J |\vec{H}| \quad (528)$$

$$\widehat{\mu}_{eff} \rightarrow \widehat{J} \Rightarrow \widehat{J}_z \Rightarrow M_J | \dots \rangle \quad (529)$$

Получилась поправка по теории возмущений в первом порядке приближения.

Рассмотрим (63):  $2P_{\frac{3}{2}}$ :  $j = \frac{3}{2}$ ,  $J = -\frac{3}{2}; -\frac{1}{2}; \frac{1}{2}; \frac{3}{2}$ ; Для данного числа  $g = \frac{4}{3}$ . Уровень расщепляется на 4 компоненты.

$S=0 \rightarrow g=1$  - обычный эффект Зеймана.

$$2P_{\frac{1}{2}} \quad j = \frac{1}{2} \rightarrow g = \frac{2}{3}$$

$$1S_{\frac{1}{2}} \rightarrow g = 2.$$

Не забываем про правила отбора  $\Delta m_j = 0; \pm 1$

В данном случае получается аномальный эффект Зеймана.

## 16.2 Различные наблюдаемые эффекты

### 16.2.1 Эффект Пашена-Бака

Это эффект превращения аномального эффекта Зеймана в нормальный эффект Зеймана при увеличении  $\uparrow \vec{H}$

### 16.2.2 Электронный парамагнитный резонанс

Светим в Мегагерцовом диапазоне.  $\vec{H}$  - плавно меняется.  
 $\mu_0(M_L + 2M_s)\vec{H}$  сравнивается с  $\omega$  увеличивается вероятность вынужденных переходов с поглощением квантов электромагнитного поля.

### 16.2.3 Эффект Штерна-Герлаха

О нём мы уже говорили. Атомы имеют магнитные моменты, которые взаимодействуют с неоднородным магнитным полем.

$$F_z = \frac{\partial H}{\partial z} g \mu_0 M_J \quad (530)$$

В результате измерения (проекционное измерение в смысле Фоннеймана) у нас в пучке с определённым  $L, S, J$  содержится много разных состояний с  $M_J$ . После прохождения через прибор Штерна-Герлаха мы получим 3 разных пучка:

$$M_J = 1 \quad M_J = 0 \quad M_J = -1$$

Далее, если пучки вторичные будут снова проходить через прибор Штерна-Герлаха, мы увидим те же самые пучки, так как за каждым этим пучком уже стоит определённое состояние, в которое мы его перевели в результате измерения. Пучки просто сильнее закрутятся.

$J=1$ , то 3 нас будет 3 пучка

$J=\frac{1}{2}$ , то 2 пучка.

Если мы повернём прибор Штерна-Герлаха, градиент неоднородного магнитного поля будет направлен теперь не по оси  $z$ , а по оси  $y$  - перпендикулярно распространению пучка, но так как операторы  $J_x$  и  $J_z$  не коммутируют, то в результате каждый пучок разойдётся на 3, но теперь уже по оси  $x$ .

Задача: имеется два ящика, в которых находятся электроны.  
В первом электроны - суперпозиция волновой функции:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle \} \quad (531)$$

В другом ящике электроны описываются матрицей плотности:

$$\frac{N}{2} |\uparrow\rangle \langle \uparrow| + \frac{N}{2} |\downarrow\rangle \langle \downarrow| \quad (532)$$

У нас есть много приборов Штерна-Герлаха. Наша задача определить в каком ящике находятся какие электроны.

## 16.3 Физика молекул

Молекулы - связанные состояния атомов.

Существует, например, ионная связь, которая легко описывается с помощью электрической теории. Но есть связи, которые без квантовой механики объяснить нельзя, например, ковалентно неполярные.

Ковалентно неполярные связи образуют:



Возникает вопрос: почему они устойчивые? Ведь они нейтральны, значит, никак не взаимодействуют. Но даже если ещё дальше углубиться, то они образуют систему из 2 заряженных ядер, вокруг которых находится отрицательное облако. Тогда они вообще должны отталкиваться!

Рассмотри гомоядерную ковалентно неполярную связь  $H_2$ , и оторвём из этой системы 1 электрон. Получится  $H_2^+$

У нас система 3 тел: электрон сверху

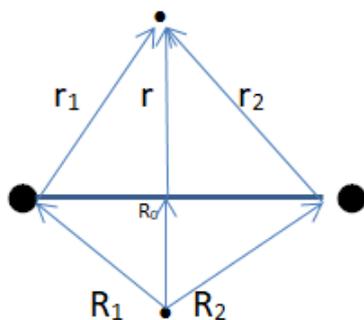


Рис. 64: Наша система

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{T}_1 + \hat{T}_2 + \hat{V}_{\text{яя}} \quad (534)$$

$\hat{T}_1$  - первого ядра,  $\hat{T}_2$  - второго ядра.

$$\hat{H}_e = \hat{T}_e - \frac{e^2}{r_1} - \frac{e^2}{r_2} \quad (535)$$

$$\hat{T}_{1,2} = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{1,2}^2 \quad (536)$$

$$\hat{V}_{\text{яя}} = \frac{e^2}{|\vec{R}_1 - \vec{R}_2|} \quad (537)$$

$$|\vec{R}_1 - \vec{R}_2| = |\vec{R}|$$

Вводим новую систему координат, с центром в центре масс.

$$\vec{R}_0 = \frac{1}{2}(\vec{R}_1 + \vec{R}_2) \quad (538)$$

$\vec{R}_0$  - посередине между ядром 1 и 2.

$$\vec{R}_{1,2} = \vec{R}_0 \mp \frac{\vec{R}}{2} \quad (539)$$

$$\frac{\partial}{\partial R_{1,2}} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial R_0} \mp \frac{\partial}{\partial R} \quad (540)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial R_{1,2}^2} = \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial R_0^2} \mp \frac{\partial^2}{\partial R \partial R_0} + \frac{\partial^2}{\partial R^2} \quad (541)$$

$$(\hat{T}_1 + \hat{T}_2) = -\frac{\hbar^2}{4M} \cdot \frac{\partial^2}{\partial R_0^2} - \frac{\hbar^2}{M} \cdot \frac{\partial^2}{\partial R^2} \quad (542)$$

$$\mu = \frac{M}{2} - \text{приведённая масса} \quad (543)$$

Выделяется 2 разных движения:

- 1) Движение самой молекулы
- 2) Движение относительно центра масс

$$\vec{r}'_{1,2} = \vec{r}' \pm \frac{\vec{R}}{2} \quad (544)$$

$$\hat{H}(\vec{r}', \vec{R}, \vec{R}_0) = (\hat{T}_e + \hat{V}_e + \hat{T}_\mu + \frac{e^2}{|\vec{R}|}) - \frac{\hbar^2}{4M} \cdot \frac{\partial}{\partial^2 R_0^2} \quad (545)$$

Производим разделение переменных:

$$\Phi(\vec{r}', \vec{R}, \vec{R}_0) = \Psi(\vec{r}', \vec{R}) \cdot \exp[\vec{K} \vec{R}_0] \quad (546)$$

$\exp[\vec{K} \vec{R}_0]$  - описывает движение как целое.

Мы упростили наше выражение, но теперь хотим ещё больше

### 16.3.1 Адиабатическое приближение

Адиабатическое приближение - приближение Борна-Оппенгеймера.

$M \gg m$ . Ошибка говорить, что в этом приближении мы пренебрегаем ядерным движением, мы считаем, что оно много медленней движения электронов. То есть, для каждого значения межядерного расстояния  $|\vec{R}|$  успевает установиться электронная функция.

$$\Psi(\vec{r}', \vec{R}) = \Psi^{(e)}(\vec{r}'; R) \cdot \Phi^{(я)}(R) \quad (547)$$

$R$  входит как параметр.

$$\hat{H} \Psi^{(e)} \Phi = E \Psi^{(e)} \Phi \mid \cdot \frac{1}{\Psi^{(e)} \Phi} \quad (548)$$

$$\frac{\hat{H}_e \Psi^{(e)} \Phi}{\Psi^{(e)} \Phi} + \left( \hat{T}_\mu + \frac{e^2}{R} \right) \cdot \frac{\Psi^{(e)} \Phi}{\Psi^{(e)} \Phi} = E \quad (549)$$

Действует оператор на функцию, поэтому сократить не можем.

Суть адиабатического приближения:

$$\frac{\partial}{\partial R} \Psi^{(e)} \ll 1 \quad (550)$$

И тогда мы можем приближённо воспользоваться методом разделения переменных:

$$\hat{H}_e \Psi^{(e)}(\vec{r}, R) = E^{(e)} \Psi^{(e)} \quad (551)$$

$$\left( \hat{T}_\mu + \frac{e^2}{R} + E^{(e)} \right) \Phi = E \Phi \quad (552)$$



ФИЗИЧЕСКИЙ  
ФАКУЛЬТЕТ  
МГУ ИМЕНИ  
М.В. ЛОМОНОСОВА



*teach-in*  
ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ