Федеральное агентство по образованию
АМУРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
(ГОУ ВПО «АмГУ»)

УТВЕРЖДАЮ
Зав. кафедрой ТиЭФ
_________________Е.А. Ванина
«____»________________2007 г.

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА
УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЙ КОМПЛЕКС
для специальности 010701 «Физика»

Составитель: канд. физ.-мат. наук Котов Е.А.

г. Благовещенск
2007

Печатается по решению редакционно-издательского совета инженерно-физического факультета Амурского государственного университета.

Е.А. Котов
Учебно-методический комплекс по дисциплине «Квантовая механика» для студентов очной формы обучения специальности 010701 «Физика». – Благовещенск. Амурский государственный университет, 2007.

Учебно-методические рекомендации ориентированы на оказание помощи студентам очной формы обучения по специальности 010701 «Физика» для формирования основ физических знаний при изучении курса общей физики и конкретно для изучения квантовой механики.

СОДЕРЖАНИЕ

Федеральное агентство по образования Российской Федерации
Государственное учреждение высшего профессионального образования
АМУРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
(ГОУ ВПО «АмГУ»)

"УТВЕРЖДАЮ"
Проректор по Учебно-научной работе
___________________ Астапова Е.С..
"___"_____________________200__г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

по дисциплине "Теоретическая физика», Раздел "Квантовая теория"
для специальности 01.07.01 "Физика"
курс 3,4 семестр 6,7
Лекции 72 час. Экзамен 6,7 семестр. Зачет нет
Практические (семинарские) занятия 72 час.
Самостоятельная работа 90 час.

Всего часов 234

Контрольные работы предусмотрены
Писменные домашние задания предусмотрены

Составитель Котов Е.А.. канд. ф.-м.наук
Факультет Инженерно-физический
Кафедра Теоретической и экспериментальной физики

2006г.

Рабочая программа составлена на основании Государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования и авторских разработок по направлению специальности) 010701

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры

“____”______________200 протокол №___

Зав. кафедрой___________________(Е.А. Ванина)

Рабочая программа одобрена на заседании УМСС 01.07.01

“___”__________200 протокол №___

Председатель УМС_____________(______________)

СОГЛАСОВАНО
Начальник УМУ
___________Г.Н.Торопчина

СОГЛАСОВАНО
Председатель УМС факультета
____

СОГЛАСОВАНО
Заведующий выпускающей кафедры
______________ (Е.А. Ванина)

“____”______________200_ г.

Рабочая программа переутверждена на 200__/200__ учебный год на заседании кафедры "___"___________ протокол № ___

Зав. выпускающей кафедры ________________(__________)

Председатель УМСС ____________(__________)

Проректор по УР _____________(___________)

СТАНДАРТ ПО ПРЕДМЕТУ

Понятие состояний в квантовой теории, динамические переменные. Элементы теории представлений, эволюция векторов состояний со временем. Уравнение Шредингера. Гейзенберговская форма главного состояния, законы сохранения, представление взаимодействий. Чистые и смешенные состояния, матрица плотности, линейный матричный осциллятор. Теория водоподобного атома, общая теория моментов, приближенные методы квантовой теории, упругое рассеяние частиц. Теория излучения, основы релятивистской квантовой теории, уравнение Дирака, тождественность частиц, вторичные состояния.

ПРИНЦИП ПОСТРОЕНИЯ КУРСА

Курс состоит из лекционного блока (72 часа) и блока практических занятий (72 часа).

Курс построен на дедуктивном принципе с математическим выводом следствий из системы основополагающих постулатов (гипотезы де-Бройля, соотношения неопределенностей, уравнений Шредингера и Дирака).

ЗНАНИЯ И УМЕНИЯ СТУДЕТОВ

Основные понятия квантовой механики.

Основные экспериментальные доказательства особенностей поведения микрочастиц.

Владение математическим аппаратом квантовой механики. Вывод основных следствий на уравнения Шредингера и Дирака.

Интеграция выводов квантовой теории.

ПРЕДИСЛОВИЕ

Цель изучения дисциплины «Квантовая теория» состоит в том, чтобы представить физическую теорию как обобщение наблюдений, практического опыта и эксперимента. Физическая теория выражает связи между физическими явлениями и величинами в математической форме. Поэтому курс имеет два аспекта:

В результате изучения дисциплины «Квантовая механика» студент должен уметь:

- правильно соотносить содержание конкретных задач с общими законами физики, эффективно применять общие законы физики для решения конкретных задач в области квантовой механики и на междисциплинарных границах физики с другими областями знаний;

- пользоваться основными математическими методами, ставить и решать простейшие квантовые задачи, обрабатывать, анализировать т оценивать полученные результаты;

- строить и использовать длч изучения этих моделей доступный ему математический аппарат, включая методы вычислительной математики;
- использовать при работе справочную и учебную литературу, находить другие необходимые источники информации и работать с ними.

Объем материала, указанный в программе, не может быть не может быть полностью изложен в том числе лекций, которое предусмотрено типовым учебным планом университетов. Поэтому программа может быть выполнена лишь при полном и целесообразном использовании лекций, семинарских занятий и времени для самостоятельной работы студентов. План курса лекций определяется лектором. Однако курс не может быть совокупностью обзорных лекций по отдельным проблемам, а должен представлять собой единое логически связанное изложение основного фундаментального материала программы. Этот материал должен быть изложен на лекциях с полным теоретическим и математическим обоснованием и достаточно подробно.

С остальным материалом студент должен быть ознакомлен на качественном или даже понятийно- терминалогическом уровне.

На лекциях излагается не обязательно весь фундаментальный материал. С другой стороны, на лекциях излагается не только фундаментальный материал, но и материал описательного и понятийно-термин алогического уровня, примеры которого приведены выше.

Программой предусматривается проведение двух контрольных работ по данному разделу курса общей физики, а также двух коллоквиумов

1. по основам квантовой механики
2. по теории возмущения.

СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ «КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА»

ВВЕДЕНИЕ (6 час.)

Ограниченность классической теории и необходимость перехода к квантовым понятиям. Гипотизы Планка, Эйнштейна, Бора, де-Бройля; корпускулярно-волновой дуализм. Волновая функция и принцип суперпозиции. Вероятностная интерпретация волновой функции, принцип причинности и связанные с этим метордологические проблемы. Перспективы развития квантовой теории.

ТЕМА 1. Понятие состояний в квантовой теории. Векторы и совекторы состояний, пространство Гильберта. Условие нормировки. Разложение векторов состояний по базисным векторам, физический смысл векторов разложения. Принцип суперпозиции.   (2 час.)

ТЕМА 2. Динамические переменные в квантовой теории. Операторы как наблюдаемые и их свойства. Собственные значения и собственные векторы наблюдаемых. Дискретный и непрерывный спектры собственных значений, их физическая интерпретация. Свойства собственных векторов, их полнота; разложение векторов состояний по системе собственных векторов наблюдаемой, физический смысл коэффициентов разложения; нормировка собственных векторов в случаях дискретного и непрерывного спектров. Понятие о полном выборе наблюдаемых. Среднее значение физических величин. Состояние неопределенности для некоммутирующих наблюдаемых. Изменение физических величин (понятие идеального измерения). (4 час.)

ТЕМА 3. Элементы теории представлений. Координатное, импульсное и (матричное) представление векторов состояний и наблюдаемых. (Переход от одного представления к другому как результат унитарного преобразования; свойства унитарных преобразований) (3 час.)

ТЕМА 4. Изменение векторов состояний со временем. Основное уравнение квантовой теории. Оператор Гамильтона. Нерелятивистское приближение, Уравнение Шредингера. Стационарные состояния. Уравнение непрерывности, нормировка векторов состояний в случае дискретного и непрерывного спектров. (3 час.)

Гейзинберговская форма основного уравнения. Скобки Пуассона. Законы изменения и сохранения физических величин; связь интегралов движения с симметрией систем (квантовый аналог теоремы вириала)

Представление взаимодействия (S-матричная формулировка квантовой теории; вероятность перехода системы из начального в заданное конечное состояние). (6 час.)

ТЕМА 5. Чистые и смешанные состояния. Понятие чистого состояния. Изменение и редукция исходного состояния. Смешанные состояния, понятие о матрице плотности, примеры; (вычисление физических величин с помощью матрицы плотности).

Соотношение квантовой и классической теории. Теоремы Эренфеста. (4 час.)

ТЕМА 6. Некоторые приложения квантовой теории. Линейный гармонический осциллятор в координатном, импульсном (и матричном представлениях и в представлении чисел заполнения).

Общая теория движения в центрально-симметричном поле; собственные значения и собственные функции углового момента. Теория водородоподобного атома с учетом движения ядра. (матрица плотности); приближение неподвижного ядра. Энергетический спектр и собственные функции атома. (Движение электронов в периодическом пле. Зависимая теория твердых тел). (6 час.)

ТЕМА 7. Общая теория моментов. Собственные значения и собственные векторы моментов. Спин электронов, собственные векторы операторы спина. Уравнение Паули, свойства матриц Паули.

Векторное сложение моментов, коэффициентов Клебша-Гордана. Шаровые спиноры. (2 час.)

ТЕМА 8. Приближенные векторы квантовой теории. Квазиклассическое приближение, метод БВК. Тунельный эффект, пример.

Теория возмущений для стационарных задач с дискретным спектром при отсутствии и наличии вырождения; первое (и второе) приближения. Эффект Шарка или другой пример. (Теория возмущений при наличии близких уровней).

Вариационный метод Ритца, пример.

Квантовые подходы под действием нестационарного возмущения (нестационарная теория возмущений), (адиабатическое и внезапное включение возмущения, примеры). Плотность числа конечных состояний и вероятность перехода в единицу времени под действием периодического возмущения. Принцип детального равновесия. (6 час.)

ТЕМА 9. Упругое рассеяние частиц. Сечение рассеяния в первом броуновском приближении, условие его применимости. Формула Резерфорда или другой пример. (метод парицальных волн в теории рассеяния. Оптическая теорема. Фазовый анализ. Переход к первому броуновскому приближению. S и T – матрицы рассеяния. Теорема Липпмана-Швингера. Простейшие графики Феймана). (2 час.)

ТЕМА 10. Теория излучения. Интенсивность вынужденного и спонтанного излучения в дипольном приближении. Правила отбора, пример. (Понятие об излучении высших мультипольностей. Квантовая теория дипресии). 3 час.)

ТЕМА 11. Ограниченность нерелятивистской квантовой теории, необходимость учета релятивистских эффектов. Уравнение Клейна-Фока-Гордона (КФГ) и его применимость к описанию частиц и нулевым спином. (Полодительно- и отрицательно-частотные решения. Плотность заряда и тока, условия нормировки; частицы и античастицы. Уравнение КФГ в электромагнитном поле, двузначность плотности заряда) 2 час.)

ТЕМА 12. Уравнение Дирака. Уравнение Дирака в гамильтоновой и ковариантной формах, его применимость к описанию частиц со спином половина. Матрицы Дирака и их свойства. Уравнение непрерывности и нормировка волновой функции. (Ковалентность уравнения Дирака относительно пространственно-временных вращений и Р-, Т-, С-преобразований, физические следствия. Тензорная размерность матриц Дирака. Введение разных типов взаимодействия частиц (скалярного, псевдоскалярного, векторного и т.д.). Понятие о слабых взаимодействия с учетом нейтральных токов, нарушение Р-четности слабых взаимодействий и качественные следствия).

Угловой собственный и полный механический моменты и теории Дирака. Решение уравнений Дирака для свободных частиц, предсказание существования позитронов; понятие об электрон-позитронном вакууме. (Возможность электрон-позитронных пар электрическим полем (на основе туннельного эффекта).

Преобразование Фулди-Вусайзена, одночастичное приближение, дрожание Фредингера)

Квазирелятивистское приближение уравнения Дирака во внешнем электромагнитном поле, спин-орбитальная, контактная и релятивистская поправки, переход к уравнению Паули. Тонкая структура энергетических уровней атома водорода. Лембовский сдвиг уровней (по Вельтону). Нормальный и аномальный эффекты Зеемана. (6 час.)

ТЕМА 13. Тождественные частицы. Основное уравнение для для системы частиц. Тождественные частицы, симметричные и ассимметричные состояния. Приближение ассимметричных частиц. Принцип Паули, принципнеразличимости тождественных частиц. Обменные эффекты при рассеивании тождественных частиц со спином ноль и половина. Теория двухэлектронных атомов, пара- и орто-состояния, вклад обменных эффектов. Многоэлектронные атомы, метод Хартри-Фока. Строение сложных атомов, система элементов Менделеева. (Статистический метод Томаса-Ферми).

Теория простейших молеку4л. Гетеро- и гемеополярные молекулы. (Ион молекулы водорода (адиабатическое приближение)). Молекула водорода, (силы Ван-дер-Ваальса) (8 час.)

ТЕМА 14. Вторичное квантирование бозонов. Вторичное квантирование в случае фермионов. ОператорГамильтона в представлении вторичного квантирования, несохранение числа частиц в заданном состоянии при включении взаимодействия. Вторичное квантирование свободного электромагнитного поля, фотоны. Интенсивность спонтанного излучения частиц в дипольном приближении. (Колебания в твердом теле. Понятие о фотонах. Элементы теории чверхтекучести и сверхпроводимости). (4 час.)

СМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА (90 час.)

ТЕМЫ СЕМИНАРСКИХ ЗАНЯТИЙ

1. Понятие оператора. Уравнение на собственные значения и собственные функции оператора. Самосопряженные операторы (6 час.)
2. Вычисление средних величин токов (4 час.)
3. Теория представлений. Матрицы. (6 час.)
4. Изменение операторов во времени. Потенциальные барьеры. Интегралы движения. (8 час.)
5. Понятие состояний в квантовой теории (8 час.)
6. Основное уравнение квантовой теории. Нерелятивистское уравнение Шредингера (16 час.)
7. Некоторые приложения квантовой теории; гармонический осциллятор, движение в центрально-симметричном поле. (10 час.)
8. Частица в магнитном поле. Спин. (8 час.)

9. Приближенные методы решения квантово-механических задач. (6 час.)

ВОПРОСЫ К ЭКЗАМЕНУ

1. Физические основы квантовой механики.

2. Векторы состояний и волновые функции. Принцип суперпозиции. Ортогональность и полнота системы собственных функций.

3. Основные постулаты квантовой механики

4. Операторы. Собственные функции и собственные значения.

5. Граничные условия и правила сшивки для волновых функций.

6. Оператор импульса и оператор сдвига.

7. Коммутаторы. Состояние неопределенностей.

8. Измерения в квантовой механике.

9. Эволюция состояний во времени. Уравнение Шредингера.

10. Плотность тока вероятности.

11. Сохраняющиеся величины. Оператор четности.

12. Одномерное движение. Дискретный спектр. Постановка задачи. Общие свойства решений.

13. Прямоугольные ямы и их набор. Дельта-ямы. Тунеллирование.

14. Непрерывный спектр, остановка задачи. Одномерная задача рассеяния. Коэффициент прохождения.

15. Постановка задачи при компьютерном моделировании.

16. Гайзенберговское представление. Зависимость операторов от времени. Законы сохранения.

17. Когерентные состояния.

18 Вариационный принцип и вариационный метод.

19. Стационарная теория возмущений. Невырожденный случай.

20. Теория возмущения при наличии вырождения. Системы с близко расположенными уровнями.

21. Квазиклассическое приближение. Критерий применимости. Правила сшивки. Квантирование. Нормировка волновой функции.

22. Нестационарные состояния. Ширина и время жизни.Альфа-распад.

23. Эффект Мессбауэра. Фактор Дебая-Валлера.

24. Теория орбитального момента. Алгебра операторов момента. Собственные значения и матричные элемнты.

25. Явный вид операторов момента в сферических координатах. Собственные функции операторов момента. Случаи $l = 1$ и $l = 2$.

26. Магнитный момент выраженной частицы.

27. Частица в центральном поле. Поведение R_{nl} при $r \to 0$ и $r \to \infty$.

28. Атом водорода. Собственные функции и спектр.

29. 29. Спины. Матрицы Паули. Сложение моментов. Матричные элементы скаляров и векторов. Правила отбораю

30. Уравнение Шредингера в электромагнитном поле. Уровни Ландау. Уравнение Паули.

31. Тождественность частиц. Обменное взаимодействие.

32. Понятие о вторичном квантировании.

33. Замены теории атома. LS-квантирование. Правило Хунда.

34. Эволюция системы с гамильтонианом, зависящим от времени. Внезапные возмущения.

35. Нестационарная теория возмущений. Адиабатический случай.

36. Борновское приближение.

37. Рассеяние в Кулоновском поле.Формула Резерфорда. Атомный Формфактор. Дифракционное рассеяние.

КРИТЕРИЙ ОЦЕНКИ ЗНАНИЙ СТУДЕНТОВ

Оценка	Полнота, системность, прочность знаний	Обобщенность знаний
«Отлично»	Изложение полученных знаний в устной, письменной или графической форме, полное, в системе, в соответствии с требованиями учебной программы; допускаются единичные несущественные ошибки, самостоятельно исправляемые студентами.	Выделение существенных признаков изученного с помощью операций анализа и синтеза; выявление причинно-следственных связей; формулировка выводов и обобщений; свободное оперирование известными фактами и сведениями с использованием сведений из других предметов.
«Хорошо».	Изложение полученных знаний в устной, письменной и графической форме, полное, в системе, в соответствии с требованиями учебной программы; допускаются отдельные несущественные ошибки, исправляемые студентами после указания преподавателя на них.	Выделение существенных признаков изученного с помощью операций анализа и синтеза; выявлений причинно-следственных связей; формулировка выводов и обобщений, в которых могут быть отдельные несущественные ошибки; подтверждение изученного известными фактами и сведениями.
«удовл»	Изложение полученных знаний неполное, однако это не препятствует усвоению последующего программного	Затруднения при выполнении существенных признаков изученного, при выявлении причинно-следственных связей и

	–материала; допускаются отдельные существенные ошибки, исправление с помощью преподавателя.	формулировке выводов.
«неуд.»	Изложение учебного материала неполное, бессистемное, что препятствует усвоению последующей учебной информации; существенные ошибки, неисправляемые даже с помощью преподавателя.	Бессистемное выделение случайных признаков изученного; неумение производить простейшие операции анализа и синтеза; делать обобщения, выводы.

Промежуточный контроль – осуществляется два раза в семестр в виде контрольных точек. Преподаватель проверяет знания студентов в виде контрольных работ, тестов и др. по блоку изученной дисциплины. Фиксируется в журналах успеваемости, находящихся в деканатах. Результаты учитываются при допуске к сдаче зачета или экзамена.

ЛИТЕРАТУРА

Основная

Блохинцев Д.И. «Основы квантовой механики» Уч. пособие. С.П., М.: Лань, 2004, 664 с.

Карлов Н.В., Кириченко И.А. «Начальные главы квантовой механики» М.: Физмат, 2004, 360 с.

Балашов В.В., Доменов В.К. «Курс квантовой механики» Москва, Ижевск: РХД, 2001, 336 с.

Дополнительная

Гольдин Л.Л., Новикова Г.И. «Квантовая физика. Вводный курс» М.: Институт компьютерных исследований, 2002, 496 с.

Зелевинский В.Г. «Лекции по квантовой механике», уч. пос., Новосибирск, Сибирское университетское издательство, 2002, 499 с.

Степанов Н.Ф. «Квантовая механика и квантовая химия» м.: Мир, МГУ, 2002, 579 с.

Флюгге З. «Задачи по квантовой механике». М. Мир, 1974, т. 1-2.

Галицкий В.М., Карпаков Б.М., Коган В.И. «Задачи по квантовой механике» в 2-х томах. М.: Едиториал, УРСС, 2001.

КОНСПЕКТ ЛЕКЦИЙ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Тема 1: Введение

Немного истории (памятные даты)

14 декабря 1900 г. – «день рождения» квантовой физики. Доклад М. Планка «К теории распределения энергии излучения нормального спектра» в Немецком физическом обществе, в котором впервые введено квантование энергии [1, 251 – 257].

1905 г. – Эйнштейн ввёл понятие светового кванта, энергия которого равна $\varepsilon = \hbar\omega$. Статья «Об одной эвристической точке зрения, касающейся возникновения и превращения света» в журнале Ann. Phys. (1905, 17, 132–148) [2, 92 – 107].

1907 г. – Теория теплоёмкости твёрдого тела. А. Эйнштейн – статья «Теория излучения Планка и теория удельной теплоёмкости» в журнале Ann. Phys. (1907, 22, 180–190) [2, 134 –144].

1909 г. – корпускулярно-волновой дуализм излучения. А. Эйнштейн – доклад «О развитии наших взглядов на сущность и структуру излучения» на 81-м собрании Общества немецких естествоиспытателей в Зальцбурге. [2, 181 – 195].

1913 г. – модель атома Бора. Публикации работы «О строении атомов и молекул в журнале Phil. Mag. {1913, **26**, p. 1-25 (часть I), p. 476–502 (часть II) ,p. 857–875, (часть III)} [3, 84 – 148].

1924 г. – Де Бройль (волновая природа материи). Каждой движущейся частице сопоставляется волна с длиной $\lambda = h/p$

1925 г. – принцип Паули статья «О связи между заполнением групп электронов в атоме и сложной структурой спектров» в журнале Z. Phys. (1925, **31**, 765–783) [– С. 645-660]. Гаудсмит и Уленбек – открытие спина.

1925 г. – Гейзенберг – матричная квантовая механика (каждой физической величине сопоставляется матрица).

1926 г. – уравнение Шрёдингера.

1926г. – Борн: статистическая интерпретация волновой функции –
$dw(x,y,z,t) = \rho(x,y,z,t)dxdydz = |\psi(x,y,z,t)|^2 dxdydz$ и $\rho(x,y,z,t) = |\psi(x,y,z,t)|^2$.

1927г. – соотношения неопределённостей (Гейзенберг).

Макс Планк *(23.IV.1958 – 4.X.1947) – немецкий физик-теоретик, основоположник квантовой теории, лауреат Нобелевской премии (1918). Открытие им квантования энергии в 1900 г. стало основой для всех исследований в физике XX в. и с тех пор почти полностью обусловило её развитие. Большой вклад сделан им и в развитие термодинамики и теории относительности.*

Альберт Эйнштейн*(14.III.1879 – 18.IV.1955) – выдающийся физик-теоретик, создатель специальной и общей теорий относительности. Неоценим его вклад в создание квантовой теории. В 1905 г. Ввёл представления о дискретной, квантовой структуре излучения и световом кванте. Исходя из них, объяснил такие явления как фотоэффект, правило Стокса для флюоресценции, фотоионизацию и др.(Нобелевская премия, 1921).*

Нильс Бор

Луи де Бройль

Вольфганг Паули

Вернер Гейзенберг
***Эрвин Шрёдингер** (12.VIII.1887 – 4.I.1961)*

Литература

1. Макс Планк. Единство физической картины мира: Сборник статей / Отв. ред. Б. Г. Кузнецов; Составитель У. И. Франкфурт. – М.: Наука, 1974. – 288 с.
2. А. Эйнштейн. Собрание научных трудов. – В 4-х т. – Т. III. Работы по кинетической теории, теории излучения и основам квантовой механики 1901-1955. – М.: Наука, 1966. – 632 с.
3. Н. Бор. Избранные научные труды. – В 2-х т. – Т. I. Статьи 1909 –1925.
4. В. Паули. Труды по квантовой теории: квантовая теория, общие принципы волновой механики, статьи 1920–1928. – М.: Наука, 1975. – 683 с.
5. Ю. А. Храмов. Физики: Биографический справочник. – 2-е изд., перераб., испр. и дополн. – М.: Наука, Главная редакция физико-математической литературы,1983. – 400 с.
6. Макс Планк. Избранные труды. – М.: Наука,1975. – 788.

Тема 2: Уравнение Шрёдингера. Уравнение Шрёдингера для стационарных состояний

В настоящее время возможно изложение квантовой механики с использованием внешне различных математических структур. Исходной для первой – на основе теории матриц – послужила матричная механика В. Гейзенберга. Волновая механика Шрёдингера базируется на теории дифференциальных уравнений (в 1926 г. Э. Шрёдингер показал эквивалентность «матричной» и «волновой» механик). П. А. М. Дирак разработал аппарат, обобщающий формулировки В. Гейзенберга и Э. Шрёдингера. Наконец, Фейнман предложил описание квантовых явлений на основе так называемых интегралов по траекториям. Естественно, что описания физических процессов, получаемые в рамках этих формулировок тождественны.

В нашей учебной литературе для изложения основ квантовой механики чаще других используется уравнение Шрёдингера. По-видимому, это связано с тем, что его «вывод» проще и нагляднее. Конечно, говорить здесь о выводе всё равно, что говорить о выводе 2-го закона Ньютона: в обоих случаях речь идет об обобщении результатов многочисленных экспериментов. Просто для уравнения Шрёдингера путь от эксперимента к теоретическому описанию более опосредован, чем формулировка законов классической механики.

Попытаемся записать уравнение Шрёдингера исходя из эвристических соображений, базирующихся на подтверждённых в огромном числе опытов представлениях, что все частицы в природе обладают как волновыми, так и корпускулярными свойствами (корпускулярно-волновой дуализм). Рассмотрим сначала простейшую ситуацию со свободно движущейся частицей, которой сопоставляется волна, частота которой определяется формулой Эйнштейна $\varepsilon = \hbar\omega$, а волновой вектор в соответствии с формулой де Бройля $p=h/\lambda$ равен $k = 2/\lambda = 2\pi p/h = p/\hbar$:

$$\Psi(x,t) = Ae^{i(\omega t - kx)}.$$

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

- общий вид уравнения Шрёдингера.

$$\boxed{\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(x)}$$

Состояние физической системы, энергия которого постоянна: $\hat{H}\Psi(x,t) = E\Psi(x,t)$

где $E = const$, называется *стационарным*. Уравнение Шрёдингера для стационарных состояний:

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = E\Psi(x,t)$$

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\tau(t)$$

$$i\hbar\psi(x)\frac{d\tau(t)}{dt} = E\psi(x)\tau(t)$$

$$\frac{d\tau}{dt} = -i\frac{E}{\hbar}\tau(t)$$

$$\frac{d\tau(t)}{\tau(t)} = -i\frac{E}{\hbar}dt, \quad \ln\tau(t) = -i\frac{E}{\hbar}t,$$

$$\tau(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}\cdot t}$$

Для стационарных состояний, таким образом, волновая функция имеет вид

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

$$i\hbar\left(-\frac{i}{\hbar}\right)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\psi(x) = \hat{H}e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\psi(x)$$

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

NB Уравнение Шрёдингера можно получить из уравнений классической механики формальной заменой импульса и функции Гамильтона на соответствующие операторы:

$$\hat{H} = \frac{p_x^2}{2m} + U(x) \Rightarrow \hat{H} = -\frac{\hbar^2\partial^2}{2m\partial x^2} + U(x)$$

$$\hat{H} \Rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \ \hat{\mathbf{p}} \Rightarrow -i\hbar\nabla, \ \hat{p}_x \Rightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \ \hat{p}_y \Rightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \ \hat{p}_z \Rightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

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

ГЛАВА 1. Простейшие задачи квантовой механики

§1. Частица в потенциальной яме

1. Постановка задачи и основные определения

Определение. Потенциальная яма – область пространства, в которой потенциальная энергия частицы меньше, чем в окружающей её области.

Потенциальная яма – модель, соответствующая реальной ситуации и описывающая основные черты этой ситуации.

Мы рассмотрим простейшую задачу о частице в бесконечно глубокой потенциальной яме. Эта модель может быть сопоставлена реальным физическим системам, для которых характерно движение частицы в ограниченной области пространства. Примерами могут служить: 1) молекула или атом газа, находящегося в закрытом сосуде; 2) электрон в металле; 3) электроны в атоме; 1) α-частица в ядре атома. Естественно, что эта модель весьма груба: реальные физические процессы разыгрываются в трёхмерном пространстве, форма потенциальной ямы может быть другой, не учитывается возможность выхода частицы из потенциальной ямы и т. д. Однако в первом приближении она даёт возможность описать какие-то свойства микрообъекта при его движении в ограниченной области пространства. Если расхождения между свойствами, предписываемыми моделью, и свойствами реальной системы значительны, то модель должна быть усовершенствована.

Таким образом, мы будем решать уравнение Шрёдингера для движения микрочастицы в потенциальной яме вида:

$$\boxed{U(x) = \begin{cases} 0, \text{если } x \in [0, L] \\ \infty, \text{если } x \notin [0, L] \end{cases}} \qquad (1$$

Поскольку частица не взаимодействует ни с какими другими объектами, то её энергия постоянна. Иными словами она находится в стационарном состоянии, и для описания её поведения мы можем воспользоваться уравнением Шрёдингера для стационарных состояний:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x). \qquad (2$$

Частица не может выйти за пределы области [0, L] – для этого ей нужно совершить бесконечно большую работу, что невозможно. Вследствие этого вероятность её обнаружения вне потенциальной ямы равна нулю и, следовательно, $\psi(x) = 0$. Так как волновая функция должна быть непрерывной, то она равна нулю и на границах области [0, L]:

$$\psi(x)\big|_{x=0} = 0, \qquad \psi(x)\big|_{x=L} = 0.$$

В рассматриваемой области движения потенциальная энергия равна нулю с математической точки зрения задача заключается в решении дифференциального уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\Psi(x)$$

при условиях, что

$$\psi(x)\big|_{x=0} = 0, \quad \psi(x)\big|_{x=l} = 0.$$

Традиционно вводят обозначение

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar} > 0.$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0.$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\Psi(x) = 0$$

Решение уравнения для частицы в потенциальной яме. $\psi(x) = C_1\psi_1 + C_2\psi_2$

$$\psi(x) = A\cos kx + B\sin kx$$

С учётом граничных условий имеем: при $\psi(x)|_{x=0}$ $A\underbrace{\cos 0}_{1} + B\underbrace{\sin 0}_{0} = 0 \Rightarrow A = 0$

$\psi(x)\big|_{x=L} = B\sin kL = 0$ $B\sin kL = 0$, $B \neq 0$, поэтому $\sin kL = 0$, откуда следует что $kL = n\pi$, $n = \pm1, \pm2, \pm3, \ldots$

$$k_n = \frac{n\pi}{L}, \quad \psi_n(x) = B\sin\frac{\pi n}{L}x$$

$$|\psi_n|^2 = \rho_n(x) \qquad dw_n(x) = |\psi_n(x)|^2\,dx$$

$$\int_0^L dw_n(x) = 1$$

$$\left|B^2\right| \cdot \int_0^L \sin^2 \frac{\pi n}{L} x dx = 1$$

$$\left|B^2\right| \int_0^L \frac{1}{2}\left(1 - \cos\frac{2\pi n}{L}x\right)dx = 1, \quad |B|^2\left(\frac{L}{2} + \frac{L}{2\pi n}\sin 2\frac{\pi n}{L}x\right)\Bigg|_0^L = 1 \text{ и } B = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

Таким образом, $\psi_n(x) = \sqrt{\dfrac{2}{L}}\sin\dfrac{\pi n}{L}x$, $n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots$

$$k_n{}^2 = \frac{2mE}{L}, \ k_n = \frac{\pi n}{L}$$

$$\psi_n(x) = \frac{2}{L}\sin\frac{\pi n}{L}x$$

$$k_n^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \Rightarrow E = \frac{k_n^2 L}{2m} = \left(\frac{\pi n}{L}\right)^2 \cdot \frac{\hbar^2}{2m}$$

$$E_n = \frac{1}{2m}\left(\frac{\pi n\hbar}{L}\right)^2 \Rightarrow E_n = \frac{p_n^2}{2m}, \text{ откуда } p_n = \frac{\pi n\hbar}{L}$$

$$E_1 = \frac{1}{2m}\left(\frac{\pi\hbar}{L}\right)^2, E_2 = 4E_1, E_3 = 9E_1, E_4 = 16E_1, \ldots$$

$$E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2L^2\hbar^2 m}\left[(n+1)^2 - n^2\right] = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}(2n+1)$$

$$\Delta E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}(2m+1), \quad \hbar \approx 10^{-27}\ \text{эрг}\cdot\text{с}, \ \Delta E = 0$$

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{2n+1}{n^2} \underset{n\to\infty}{\to} 0$$

$$\Delta x \Delta p_x \geq 2\pi\hbar \quad \Delta x \sim L, \ \Delta p_x \approx \frac{2\pi\hbar}{L}$$

$$p_x \approx \bar{p}_x + \Delta p_x, \text{ минимальное } \bar{p} = 0, \text{ при этом } p_x \approx \Delta p_x \approx \frac{2\pi\hbar}{L}$$

$$E \approx \frac{p_x^2}{2m} = 4\frac{1}{2m}\left(\frac{\pi\hbar}{L}\right)^2 = E_2 \approx E_1$$

Поведение волновой функции

$$|\psi_1(x)|^2 = \frac{2}{L}\sin^2\frac{\pi}{L}x, \ |\psi_2(x)|^2 = \frac{2}{L}\sin^2\frac{2\pi}{L}x, \ |\psi_3(x)|^2 = \frac{2}{L}\sin^2\frac{3\pi}{L}, \ldots$$

Плотность вероятности обнаружения частицы в различных точках потенциальной ямы различна. Число этих max и min определяется квантовым числом n.

$$|\psi_n(x)|^2 = \frac{2}{L}\sin^2\frac{\pi n}{L}x = \frac{1}{L}\left(1 + \cos\frac{2\pi n}{L}\right)$$

С точки зрения классической физики обнаружение частицы в любой точке интервала $(0, L)$ – события равновероятные, поскольку физические условия во всех точках данного интервала одинаковы. Поэтому вероятность $dw(x)$ её обнаружения в интервале $(x, x + dx)$ пропорциональна величине этого интервала:

$$dw_{кл} = \rho_{кл} dx = c dx.$$

Из условия нормировки $\int_0^L dw(x) = c\int_0^L dx = cL = 1$ определяется c = 1/L, то есть $\rho_{кл} = c = 1/L$

Поведение плотности вероятности при $n \to\infty$ можно установить, находя вероятность обнаружения частицы в произвольном интервале (a,b), включённом в интервал $(0,L)$:

$$\int_a^b dw_\infty(x) = \int_a^b \rho_\infty(x)dx = \lim_{n\to\infty}\int_a^b \psi_n^2(x)dx = \frac{2}{L}\lim_{n\to\infty}\int_a^b \sin^2\left(\frac{2\pi n}{L}x\right)dx =$$

$$= \frac{1}{L}\lim_{n\to\infty}\int_a^b\left(1-\cos\frac{2\pi n}{L}x\right)dx = \frac{1}{L}\lim_{n\to\infty}\left[(b-a) - \frac{L}{4\pi n}\sin\frac{2\pi n}{L}\Big|_a^b\right] = \frac{b-a}{L},$$

откуда

$$\int_a^b \rho_\infty(x)dx = \frac{b-a}{L}.$$

Это равенство выполняется для любых a и b из интервала $(0, L)$, что возможно только при $\rho_\infty(x) = 1/L$. Таким образом, выполняется принцип соответствия Бора: при больших квантовых числах квантовомеханическое описание физической системы переходит в классическое.

Вывод: о дискретности физических величин, характеризующих движение в потенциальной яме. Низший энергетический уровень $\neq 0$, так как это не согласуется с принципом соответствия. Волновая функция даёт для ρ вероятности совокупность max и min.

ЛИНЕЙНЫЙ ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

Воспоминания о классическом осцилляторе:

$$f = -kx \Rightarrow U(x) = \frac{kx^2}{2}$$

$$f(x) = -\operatorname{grad}U(x)$$

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -kx$$

$$x = A\sin(\omega t + \rho_0),\ v = \dot{x} = A\omega^2\cos(\omega t + \varphi).$$

$$E = T(\dot{x}) + U(x) = \frac{mA^2}{2}\omega^2\cos^2(\omega t + \varphi) + \frac{m\omega^2}{2}A^2\sin(\omega t + \varphi) = \frac{m\omega^2A^2}{2}.$$

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0 \quad E = \frac{m\omega^2A^2}{2} \quad \omega^2 = \frac{k}{m}$$

$$E = \frac{p_x^2}{2m} + U(x) \qquad \hat{p}_x = -i\hbar\frac{d}{dx}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2 d^2}{2mdx^2} + \frac{m\omega^2x^2}{2}\right]\cdot\psi(x) = E\psi(x)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left[E - \frac{m\omega^2x^2}{2}\right]\cdot\psi(x) = 0$$

– уравнение Шрёдингера для линейного гармонического осциллятора.

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m^2\omega^2x^2}{\hbar^2}\right]\cdot\psi(x) = 0$$

$$\xi = \alpha x \Rightarrow \quad x = \frac{\xi}{\alpha}$$

$$\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2\alpha^2} - \frac{m\omega^2\xi^2}{\alpha^4\hbar^2}\right]\cdot\psi(\xi) = 0$$

$$\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2\alpha^4} = 1 \qquad\qquad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

$$\lambda = \frac{2mE}{\hbar^2\alpha^2} = \frac{2mE}{\hbar^2 m\omega} = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

$$E = \frac{\hbar\omega}{2}\cdot\lambda$$

$$\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} + [\lambda - \xi^2]\cdot\psi(\xi) = 0$$

Решение уравнения проведём в два этапа, рассмотрев сначала случай 1) $\xi^2 >> \lambda$, а затем случай 2) $\xi^2 << \lambda$.

1) $\xi^2 >> \lambda$.

$$\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi} = \xi^2\psi(\xi),$$

$$\psi(\xi) \approx e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

$$\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} = (\xi^2 - 1)e^{-\frac{\xi^2}{2}} \approx \xi^2 e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

В рассматриваемом приближении $\xi^2 >> \lambda$ (а следовательно, в силу произвольности λ, $\xi^2 >> \lambda + 1$) функция () удовлетворяет уравнению (). В самом деле, при подстановке в уравнение () имеем:

$$\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} + (\lambda + 1 - \xi^2)e^{-\frac{\xi^2}{2}} = 0 \Rightarrow \frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} - \xi^2 e^{-\frac{\xi^2}{2}} \cong 0$$

$\psi(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2}}\cdot H(\xi)$, $\quad H(\xi) = \sum_{\nu=0}^{\infty} C_n\xi^n$ Введём $\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2 x = 0$, $E = \frac{m\omega^2 A^2}{2}$

$$\lim_{\xi\to\pm\infty} e^{-\frac{\xi^2}{2}}\xi^\nu = \lim_{y\to+\infty}\frac{2^{\frac{\nu}{2}}y^{\frac{\nu}{2}}}{e^y} = \lim_{y\to+\infty}\frac{2^{\frac{\nu-2}{2}}\nu y^{\frac{\nu-3}{2}}}{e^y} = \lim_{\xi\to+\infty}\frac{2^{\frac{\nu-4}{2}}\nu(\nu-3)\cdot y^{\frac{\nu-5}{2}}}{e^y} = \ldots = \left\{\begin{array}{l}\lim\limits_{y\to+\infty}\dfrac{\left(\frac{\nu}{2}\right)!}{e^y}\\ \lim\limits_{y\to+\infty}\dfrac{\left(\frac{\nu}{2}-\nu-1\right)!}{e^y}\end{array}\right. = 0$$

б) $\dfrac{d^2H(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi\dfrac{dH(\xi)}{d\xi} + (\lambda-1)\cdot H(\xi) = 0$

$$\frac{dH(\zeta)}{d\zeta} = \sum_{n=1}^{\infty} C_n n\zeta^{n-1} \qquad \frac{d^2H(\zeta)}{d\zeta^2} = \sum_{n=2}^{\infty} C_n \cdot n(n-1)\zeta^{n-2} = \sum_{n=0}^{\infty} C_{n+2}(n+2)(n+1)\zeta^n$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} f_n \varepsilon_g^n = 0$$

$$n' - 2 = n$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} C_{n+2}(n+2)(n+1)\xi^n - \sum_{n=1}^{\infty} 2C_n n\xi^n + (\lambda-1)\sum_{n=0}^{\infty} C_n\xi^n = 0$$

$$C_2\cdot 2\cdot 1 + (\lambda-1)\cdot C_0 + \ldots + \sum_{n=1}^{\infty}\{C_{n+2}(n+2)(n+1) + [\lambda-(2n+1)]C_n\}\xi^n = 0$$

$$2C_2 + (\lambda-1)C_0 = 0$$

$$3\cdot 2\cdot C_3 + (\lambda-3)C_1 = 0$$

$$\ldots$$

$$C_{n+2}(n+2)(n+1) + [\lambda-(2n+1)]C_n = 0$$

$$\ldots$$

$$C_{n+2} = \frac{2n+1-\lambda}{(n+2)(n+1)}\cdot C_n$$

1) $C_0 \to C_2 \to C_4 \to C_6 \to$

Чётные коэффициенты выражаем через C_0, нечётные через C_1

$$H(\varepsilon) = C_0\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(1-\lambda)(5-\lambda)(9-\lambda)\ldots(4n+1-\lambda)}{(2n+2)!}\xi^{2n} + C_1\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(3-\lambda)(7-\lambda)(11-\lambda)\ldots(4n+3-\lambda)}{(2n+3)!}\xi^{2n+1}$$

2) $\dfrac{C_{n+2}}{C_n} = \dfrac{2n-(\lambda-1)}{(n+2)(n+1)} \xrightarrow[n\to\infty]{} \dfrac{2n}{n^2} = \dfrac{2}{n} \sim \dfrac{1}{n}$

$$e^{\xi^2} = 1 + \frac{1}{1!}\xi^2 + \frac{1}{2!}\xi^4 + \ldots + \frac{1}{n!}\xi^{2n} + \frac{1}{(n+1)!}\xi^{2n+2} + \ldots$$

{Более точно $e^{2\xi^2} = 1 + \dfrac{1}{1!}2\xi^2 + \dfrac{1}{2!}4\xi^4 + \ldots + \dfrac{1}{n!}2^n\xi^{2n} + \dfrac{2^{n+1}}{(n+1)!}\xi^{2n+2} + \ldots$ }

$$\frac{C_{n+1}}{C_n} = \frac{1}{(n+1)!}\cdot\frac{n!}{1} = \frac{1}{n+1} \approx \frac{1}{n}$$

$$\psi(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2}}\cdot e^{\xi^2} = e^{\frac{\xi^2}{2}} \xrightarrow[\xi\to 0]{} \infty$$

Таким образом, оба ряда при больших n ведут себя как $\exp(\xi^2/2)$, что противоречит требованию конечности волновой функции. Этому условию можно удовлетворить, если выбрать $\lambda = 2n + 1$. В этом случае один из рядов обрывается, превращаясь в полином, а от другого можно избавиться, приравняв нулю коэффициент, на который он умножается. В этом случае при n чётном мы получаем полиномы по чётным степеням ξ (при этом $C_1 = 0$), при n нечётном – полиномы по нечётным степеням ξ (C_0=0):

$$\lambda = 2n+1: \begin{cases} n - \text{чётное}, C_0 \neq 0, C_1 = 0 \\ n - \text{нечётное}, C_0 = 0, C_1 \neq 0. \end{cases}$$

' ≈ ~ ≠ ± ≥ ≤ ≡ λ
Δ θ μ ψ ω φ Ψ § ξ

Для того, чтобы существовало решение, удовлетворяющее приведённым выше требованиям ($\psi(\varepsilon) \xrightarrow[\varepsilon\to 0]{} 0$), необходимо, чтобы какой-либо из рядов обрывался, т.е. имел вид полинома.
В качестве решения берём тот ряд, который превратился в полином, а второй удаляем, положив равным нулю тот коэффициент, на который умножаем.
Полученные полиномы называются полиномами Эрмита.

$H_n(\varepsilon)$ $\qquad$ $\psi_n(\varepsilon) = N_n e^{-\frac{\varepsilon^2}{2}} H_n(\varepsilon)$

$$H_n(\varepsilon) = (-1)^n e^{\varepsilon^2} \frac{d^4 e^{-\varepsilon^2}}{d\varepsilon^2}$$

$H_0(\varepsilon)$
$H_1(\varepsilon)$
$H_2(\varepsilon)$
$H_3(\varepsilon)$

1. $\psi_n(\varepsilon) \to \psi_n(x)$

2. $\int\limits_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$

$$\psi_n(\varepsilon) = \psi_n(dx) = N_n e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)$$

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$$

Замечание: Калибровка волновой функции.
Волновая функция всегда определена с точностью до последнего множителя.

$\Psi(x) \approx e^{i\alpha}\psi(x)$

$|\psi(x)|^2 = \rho(x)$

$\Psi(x) \cdot \Psi^*(x) = \rho(x)$

$e^{i\alpha}\Psi(x) e^{-i\alpha}\Psi^*(x) = \rho(x)$

$$|N_n|^2 \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} H_n^2(x) dx = 1$$

$$|N_n|^2 = N_n^2 = \frac{1}{\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} H_n^2(x) dx}$$

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} H_n^2\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) dx = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-\zeta^2} H_n(\zeta) d\left(\zeta \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\right) = 1$$

$$\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-\zeta^2} (-1)^n e^{\zeta^2} \frac{d^n e^{-\zeta}}{d\zeta^n} H_n(\zeta) = 1$$

$$(-1)^n \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{d^n e^{-\zeta}}{d\zeta^n} H_n(\zeta)\, d\zeta = 1$$

$$(-1)^n \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-\zeta^2} \frac{d^n}{d\zeta^n} H_n(\zeta)$$

$$N_n^2 = \frac{1}{2^n n! \sqrt{\hbar}} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

$$\psi(x) = N_0 e^{-\sqrt{\frac{m\omega}{\partial\hbar}}x^2} H_n(x)$$

$$N_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}$$

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)$$

1) $\Psi_n(x)$;

2) $\lambda = 2n+1 \to E = \frac{\hbar\omega}{2}(2n+1); E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$

$\Psi_n(x) = N_n e^{-\alpha\zeta^2} H_n(\alpha\zeta)$

$\left[H_n(\zeta) = C_0 + C_2\zeta^2 + C_4\zeta^4 + \ldots + C_n\zeta^n\right]$

1. $E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$

$E = \frac{m\omega^2 A^2}{2}$; $E_n = \hbar\omega n$

$\Delta x \Delta p_x \ge 2\pi\hbar \Rightarrow E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$

Вывод: энергия осциллятора изменяется дискретно.

$E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$

$\Delta E_n = \hbar\omega \to E_n = \hbar\omega n$

$\{E_n = h\nu n\}$

$E_n = \frac{\hbar\omega}{2}$

$\Delta x \Delta p_x \ge 2\pi\hbar$

$: \Delta x \approx A; \Delta p_x \approx p_x$

$$\Delta E_n \xrightarrow[\substack{\hbar\to 0 \\ (\hbar<<1)}]{} 0$$

$\hbar \to 0 (c \to +\infty)$

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{1}{n+\frac{1}{2}} \xrightarrow[n\to\infty]{} 0$$

2.Волновая функция $\psi(x)$

n=0 $\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}$ $\quad x_0 = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi}}$

n=1 $\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2x_0\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} \cdot 2\frac{x}{x_0}$

n=2 $\psi_2(x) = \frac{1}{2\sqrt{2x_0\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} \cdot (4\frac{x^2}{x_0^2} - 2)$

$\rho_n(x) = |\psi_n(x)|^2$

В некоторых точках вероятность обнаружения линейного гармонического осциллятора равна 0, а в некоторых максимальна.

Вероятность нахождения x:

$$d\omega(x) = \frac{dt}{T} = \frac{Vdt}{TV} = \frac{dx}{TA\omega\cos\omega t} = \frac{dx}{TA\omega\sqrt{1-\sin^2\omega t}} = \frac{dx}{2\pi\sqrt{A^2 - x^2}}$$

$$x = A\sin\omega t$$

$$E_n = \frac{m\omega^2 A_n^2}{2} = h\omega(n + \frac{1}{2})$$

Прохождение частиц через потенциальный барьер.

1. Потенциальный барьер – область пространства, в которой потенциальная энергия больше чем в соседних участках пространства.

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

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

$$\downarrow$$

$$E = \frac{p_x^2}{2m} + U(x)$$

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

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

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

Необходимо задать начальные условия.

$$\psi(x) = e^{ikx} \qquad k = \frac{\lambda}{2\pi} \qquad \lambda = \frac{h}{\pi}$$

$$p = \hbar k$$

$$\Psi() = Ae^{-i(\frac{E}{\hbar}t - kx)} = Ae^{-i(\omega t - kx)}$$

Будем рассматривать прямоугольный потенциальный барьер:

$$U(x): \begin{cases} 0, x < 0 \\ U_0, 0 \le x \le L \\ 0, x > L \end{cases}$$

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \quad \text{и} \quad \psi_2(L) = \psi_3(L)$$
$$\psi'_1(0) = \psi'_2(0) \qquad\quad \psi'_2(L) = \psi'_3(L)$$

1 область $\dfrac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \dfrac{2mE}{\hbar^2}\psi_1(x) = 0$

2 область $\dfrac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} + \dfrac{2m}{\hbar^2}[E - U_0]\psi_2(x) = 0 \quad \Rightarrow$

$$\left| \begin{array}{l} k^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2} \\[2ex] \dfrac{2m}{\hbar}(E - U_0) = \dfrac{2mE}{\hbar^2}\left(1 - \dfrac{U_0}{E}\right) = k^2 n^2 \end{array} \right|$$

3 область $\dfrac{d^2\psi_3(x)}{dx^2} + \dfrac{2mE}{\hbar^2}\psi_3(x) = 0$

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + k^2\psi_1(x) = 0$$

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} + k^2 n^2\psi_2(x) = 0$$

$$\frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2} + k^2\psi_3(x) = 0$$

2.Плотность вероятности и поток плотности вероятности.

Уравнение Шрёдингера имеет вид:

-для стационарных состояний

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

Для комплексно-сопряжённых функций:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2\psi^*}{dx^2} + U(x)\psi^*(x) = E\psi^*(x)$$

-для стационарных состояний

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi(x) = i\hbar\frac{d\psi}{dt} \qquad \times\psi^*(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2\psi^*}{dx^2} + U(x)\psi^*(x) = -i\hbar\frac{d\psi^*}{dt} \qquad \times\psi(x)$$

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

$$\frac{\partial(\psi\psi^*)}{\partial t} = -\frac{h}{2im}\cdot\frac{d}{dx}\left(\frac{d\psi^*}{dx}\psi - \frac{d\psi}{dx}\psi^*\right)$$

$$\rho = \psi\psi^* \qquad j_x = -\frac{h}{2im}\left(\frac{d\psi^*}{dx}\psi - \frac{d\psi}{dx}\psi^*\right)$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\frac{\partial j_x}{\partial x}$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial j_x}{\partial x} = 0$$

$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{dy} + \frac{\partial j_z}{dz} = 0$ - в трёхмерной ситуации

Вывод: таким образом в квантовой механике мы получаем уравнения непрерывности потока для вероятности.

ρ - плотность вероятности

j_x - поток вероятности

$$\psi(x) = e^{ikx}$$

$$\psi^*(x) = e^{-ikx}$$

$$\frac{d\psi}{dx} = e^{ikx}\cdot ik$$

$$\frac{d\psi^*}{dx} = -e^{-ikx}\cdot ik$$

$$j_x = \frac{\hbar}{2im}(ike^{ikx}e^{-ikx} - ike^{-ikx}e^{ikx}) = \frac{2ik\hbar}{2im} = \frac{\rho}{m} = \frac{mv}{m} = v \qquad j = n_0 v$$

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}; \quad n^2 = 1 - \frac{U_0}{E}$$

1) $E > U_0$

2) $E < U_0 \qquad |n| = \sqrt{\frac{U_0}{E} - 1}$

$$\frac{mv^2}{2} > mgh \qquad j_0 = j_3$$

$$\frac{mv^2}{2} < mgh \qquad j_0 = j_1$$

$$\psi_2(x) = \alpha e^{knx} + \beta e^{-iknx} \qquad \cdot e^{-i\omega t}e^{ikx} = e^{-i(\omega t + kx)}$$

$$\psi_3(x) = ae^{ikx} + be^{-ikx} \qquad \cdot e^{-i\omega t}e^{-ikx} = e^{-i(\omega t - kx)}$$

$$k = \frac{\omega}{v}$$

$$\psi(x,t) = \psi(x)e^{-ikt} = \psi(x)e^{-i\omega t}$$

b=0, т.к. нет волны, идущей справа налево.

A=1

$$\psi_1(x) = e^{ikx} + \beta e^{-ikx}$$
$$\psi_2(x) = \alpha e^{iknx} - ik\beta e^{ikx}$$
$$\psi_3(x) = ae^{ikx}$$
$$1 + \beta = \alpha + \beta$$
$$\psi'_1(x) = ike^{iknx} ik\beta e^{ikx}$$
$$\psi'_2(x) = \alpha ike^{iknx} - ikn\beta e^{-iknx}$$
$$\psi'_3(x) = aike^{ikx}$$
$$1 + \beta = \alpha + \beta$$
$$ik - ik = ikn\alpha - ikn\beta$$
$$\alpha e^{iknL} + \beta e^{-iknL} = ae^{ikL}$$
$$ikn\alpha e^{iknL} - ikn\beta e^{iknL} = ike^{ikL}$$

$$1 + \beta = \alpha + \beta$$
$$1 - \beta = (\alpha - \beta)n$$
$$2e^{iknL} + \beta e^{-iknL} = ae^{ikL}$$
$$\alpha ne^{iknL} - n\beta e^{-iknL} = ae^{ikL}$$

$$(1 + n)\alpha + (1 - n)\beta = 2$$
$$(1 - n)e^{iknL}\alpha + (1 + n)e^{-iknL} = 0$$

$$\Delta : \begin{vmatrix} 1+n & 1-n \\ (1-n)e^{iknL} & (1+n)e^{-iknL} \end{vmatrix}$$

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$
$$\psi_2(x) = \alpha e^{iknx} + Be^{-iknx}$$
$$\psi_3(x) = ae^{ikx}$$

$$1 + \beta = \gamma + \beta$$
$$\psi_1{}'(x) = iAke^{ikx} - ikBe^{ikx}$$
$$\psi_2{}'(x) = \alpha \cdot ikne^{iknx} - Bike^{-iknx} \quad \Rightarrow$$
$$\psi_3{}'(x) = a \cdot ike^{ikx}$$

$$1 + \beta = \gamma + \beta$$
$$ik - ik = ikn\alpha - ikn\beta$$
$$\alpha e^{iknL} + \beta e^{-iknL} = ae^{ik}$$
$$ikn\alpha e^{iknL} - ikn\beta e^{iknL} = ikae^{ikL}$$

$$1 + \beta = \alpha + \beta$$
$$1 - \beta = n\alpha - n\beta$$
$$ikL$$

$$1 + \beta = \gamma + \beta$$
$$1 - \beta = (\alpha - \beta)n$$
$$ae^{iknL} + \beta e^{-iknL} = ae^{ikL}$$
$$\alpha ke^{iknL} - \beta ke^{-iknL} = ae^{ikL}$$

$$(1 + n)\alpha + (1 - n)\beta = 2$$
$$(1 - n)e^{iknL}\alpha + (1 + n)e^{-iknL}\beta = 0$$

$$\Delta : \begin{vmatrix} 1+n & 1-n \\ (1-n)e^{iknL} & (1+n)e^{-iknL} \end{vmatrix}$$

$$\alpha = \frac{1}{\Delta} 2(n+1) e^{-iknL}$$

$$\beta = \frac{1}{\Delta} 2(n-1) e^{iknL}$$

$$B = -\frac{2i}{\Delta}(1-n^2)\sin(knL)$$

$$a = \frac{4n}{\Delta} e^{-iknL}$$

Обсуждение вопроса.

а) j_0, j_{r, j_α}

$$R = \frac{|j_r|}{|j_0|}, \quad D = \frac{|j_\alpha|}{|j_0|}$$

$$j_0 = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = \frac{mv}{m} = v$$

$$j_r = \frac{\hbar}{2im}\left(\psi \frac{d\psi *}{dx} - \psi * \frac{d\psi}{dx}\right) = \frac{\hbar}{2im}\left(Be^{-ikx} - B * e^{ikx} Be^{ukx}(-ik)\right) = \frac{\hbar}{2im} 2|B|^2 ik = \frac{\hbar k}{m}|B|^2$$

$$j_\alpha = \frac{\hbar k}{m}|a|^2$$

$D = |B|^2$

$R = |a|^2$ $\qquad D + R = 1$; D=1, R=0

б) $E < U_0$

$R \neq 0$

$D \neq 0$ $\qquad D + R = 1$; D=0, R=1

$D_{\max}$ при $\cos 2knL = 1$

$$2knL = 2\pi m - m = 0; \pm 1; \pm 2$$

$$k = \frac{\pi}{nL} m \qquad \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\pi}{nL} m$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \qquad L = \frac{\lambda}{n^2} m$$

$E > U_0$

1. $a = \dfrac{L_m e^{-ik_0 L}}{e^{-ik_0 L}(1+n)^2 - e^{ik_0 nL}(1-n)^2}$

2. $a = \dfrac{4i|n| e^{-ik_0 L}}{e^{k_0|n|L}(1+|n|)^2 - e^{-k_0|n|L}(1-|n|)^2} (e^{-k_0|n|L})^2$

$$|a|^2 = \frac{16|n|^2}{\Delta \cdot \Delta *} = \frac{e^{-2k_0 nL} \cdot 16|n|^2}{\left|1 - \dfrac{(1-ikn)^2}{(1+ikn)^2}\right| \cdot e^{-2k_0|n|L}}$$

$$2k|n|L = 2\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\sqrt{\frac{U_0}{E} - 1} = \frac{2}{\pi}\sqrt{2m(U_0 - E)}L$$

Туннельный

$$D = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)L}} \qquad 1)\, D \neq 0$$

2) D тем больше, чем меньше L и $U_0 - E_0$

Возможность нахождения частицы в барьерной области связано с соотношением неопределённости.

D-?

$$D = \frac{|j_\alpha|}{|j_0|} \qquad |j_0| = \frac{\hbar k}{m}$$

$$D_i = D_\alpha e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)L}}$$

$$D_1 = \frac{|j_{d1}|}{|j_0|}$$

$$D_2 = \frac{|j_{d2}|}{|j_{d1}|}$$

$$D_3 = \frac{|j_{d3}|}{|j_{d2}|}\ldots$$

$$D_N = \frac{|j_{d(N-1)}|}{|j_d|}$$

$$D_1 \cdot D_2 \cdot \ldots \cdot D_n = \frac{|j_{d1}|}{|j_0|}\cdot\frac{|j_{d2}|}{|j_{d1}|}\cdot\frac{|j_{d3}|}{|j_{d2}|}\cdot\ldots\cdot\frac{|j_{dN}|}{|j_{dN-1}|} = \frac{|j_{dn}|}{|j_0|} = D$$

$$D = \prod_{i=1}^{n} D_{0i} e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}\Delta x_i}$$

$$D_0 = \prod_i D_{i0}$$

$$D_1 \cdot D_2 \cdot \ldots \cdot D_n = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar}\sum_{i=1}^{N}\sqrt{2m(U(x_i) - E)\Delta x_i}}$$

$$D = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar}\int_{x1}^{x2}\sqrt{2m[U(x) - E]}dx}$$

ГЛАВА…***Математический аппарат квантовой механики.***

1.Оператор энергии /учебник

2.Дифференцирование операторов по времени /учебник

3.Стационарные состояния /учебник

4. Однородные пространства и оператор сдвига.

1) $\hat{T}_{\vec{a}}\psi(r) = \psi(r + a)$

$$\hat{T}_{\vec{a}} = e^{\vec{a}\nabla} = 1 + \frac{1}{1!}\vec{a}\nabla + \ldots$$

$$F(\hat{L}) = F(0) + \frac{1}{1!}F(0)\hat{L} + \ldots + \frac{1}{n!}F^{(n)}(0)$$

$P = \sum p_i$

$\hat{T}_{\delta\vec{r}}\psi(r) = \psi(r + \delta r)$

$\hat{T}_{\delta\vec{r}} = 1 + \delta r\nabla$

$\hat{T}_{\vec{a}}\psi(\vec{r}_1 + \delta\vec{r}, \vec{r}_2 + \delta\vec{r}, ..., \vec{r}_n + \delta\vec{r}) \approx 1 + \sum_{i-1}^{N} \delta\vec{r}\nabla\psi$

2) Оператор импульса.

Каждой физической величине ставится в соответствие оператор импульса p

$\hat{H}\hat{p} - \hat{p}H = 0$

$\frac{\partial p}{\partial t} = 0$

$\hat{T}_{\delta\vec{r}}\hat{H}\psi = \hat{H}\hat{T}_{\delta\vec{r}} \rightarrow \hat{H}\hat{T}_{\delta\vec{r}} - \hat{T}_{\delta\vec{r}}\hat{H} = 0$

$-(1 + \delta r\nabla)\hat{H} + \hat{H}(1 + \delta r\nabla) = 0$

$-\hat{H} + \delta r\nabla\hat{H} + \hat{H} + \hat{H}\delta r\nabla = 0$

$\nabla\hat{H} - \hat{H}\nabla = 0$

$\sum_{i=1}^{N} \nabla_i \hat{H} - \hat{H}\sum_{i=1}^{N} \nabla_i = 0$

$a\nabla_i = \hat{p}_i$

$\psi(r) = Ae^{-i(\omega t - kx)}$ $\qquad k = \frac{2\pi}{\lambda}; \lambda = \frac{h}{p} \Rightarrow p = \hbar k$

$\vec{p}_x\psi(x, y, z) = a_x \frac{\partial}{\partial x} Ae^{-i(\omega t - kx)} = a_x Ae^{-i(\omega t - kx)}(ik) = \frac{ika_x A}{p_x} e^{-i(\omega t - kx)}$

$p_x = -ika_x = ka_x = \hbar k$

$a_x = i\hbar \qquad p_x = -ik(i\hbar) = \hbar k$

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

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

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

3 условия:

1. оператор линейный;
2. оператор самосопряжённый;
3. собственные значения.

В квантовой механике: $\hat{p} = -i\hbar\nabla$

3) Свойства оператора импульса.

$$\begin{cases} \hat{p}_x\hat{p}_y - \hat{p}_y\hat{p}_x = 0 \\ \hat{p}_x\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{p}_x = 0 \\ \hat{p}_y\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{p}_y = 0 \end{cases}$$

$$(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}) - (-i\hbar\frac{\partial}{\partial y})(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}) = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x\partial y} + \hbar^2\frac{\partial^2}{\partial y\partial x} = 0$$

$$[\vec{p}_x, \hat{x}]\psi(x) = \hat{p}_x \cdot x\psi(x) - x\hat{p}_x\psi(x) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\psi) + xi\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x} = -i\hbar\psi - i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x} + xi\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

$$[x, \hat{p}_x] = i\hbar \qquad [x, \hat{p}_y] = 0 \qquad [x_i, \hat{p}_k = i\hbar\delta_{ik}]$$

$$[y, \hat{p}_y] = i\hbar \qquad [x, \hat{p}_z] = \ldots \qquad [x_i, x_k] = 0$$

$$[z, \hat{p}_z] = i\hbar \qquad [\hat{p}_i, \hat{p}_k] = 0$$

$$\delta_{ik} : \begin{cases} 0, i \neq k \\ 1, i = k \end{cases}$$

4) Собственные функции оператора импульса.

$$\hat{p}\psi(r) = \hat{p}\Psi(r) \qquad (-\infty < x, y, z < +\infty)$$

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi(x,y,z)}{\partial x} = p_x\Psi(x,y,z)$$

$$\Psi(x,y,z) = \Psi_1(x)\Psi_2(y)\Psi_3(z)$$

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi_1(x)}{\partial x} = p_x\Psi_1(x)$$

$$\frac{d\Psi_1(x)}{\Psi_1(x)} = \frac{i}{\hbar}p_x dx$$

$$\ln\Psi_1(x) = \frac{i}{\hbar}p_x x + \ln C$$

$$\Psi_1(x) = C_1 e^{i\frac{p_x x}{\hbar}} = C_1 e^{ik_x x} \qquad k_x = \frac{p}{\hbar}$$

$$\Psi_2(x) = C_2 e^{i\frac{p_y y}{\hbar}} = C_2 e^{ik_y y}$$

$$\Psi_3(x) = C_3 e^{i\frac{p_z z}{\hbar}} = C_3 e^{ik_z z}$$

$$\Psi(x,y,z) = Ce^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} = Ce^{i\vec{k}\vec{r}}$$

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int e^{-ikx}dx$$

$$\int \Psi_m^*\Psi_n dx : \begin{cases} 0, m \neq n \\ 1, m = n \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_{p_x}{}^*(x)\Psi_{p'_x}(x)dx = |C|^2\int_{-\infty}^{+\infty}e^{i(p_x - p'_x)x}dx$$

$$|C_1|^2\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-i(p_x - p'_x)x}dx = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-i(p_x - p'_x)x}dx$$

$$C_1 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$$\Psi(x,y,z) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} \qquad p = p_x x + p_y y + p_z z$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_{k_x}{}^*\Psi_{k'_x}\,dx = \left|C_1\right|^2\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(k_x-k'_x)\frac{x}{\hbar}}dx = \left|C_1\right|^2\hbar\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(k_x-k'_x)\zeta}\,d\zeta$$

$$\Psi_{\vec{k}}(x,y,z) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

5) <u>Оператор момента импульса.</u>

п.1 ***Изотропность пространства.***

$\Psi(r,t)$

$\delta r = [\delta\varphi, r]$

$V = [\omega, r]$

$$\frac{\delta r}{\delta t} = \left[\frac{\delta\varphi}{\delta t}, \vec{r}\right] \qquad \delta r_i = [\delta\varphi, r_i]$$

$$\Psi(\vec{r}+\delta\vec{r},t) = \Psi(\vec{r},t) + \frac{1}{1!}\Psi'(\vec{r})\delta\vec{r} + \{\ldots\} \cong (1+\delta\vec{r}\nabla)\Psi(\vec{r})$$

$$\hat{T}_{\delta\vec{r}} = 1 + \delta r\nabla = 1 + [\delta\varphi, r]\nabla$$

$$\hat{T}_{\delta\vec{r}_i} = 1 + \sum_{i=1}^{N}[\delta\vec{\varphi}, \vec{r}_i]\nabla$$

Этот оператор не меняет физических свойств системы.

$$\hat{H}\hat{T}_{\delta\vec{r}} - \hat{T}_{\delta\vec{r}}\hat{H} = 0$$

$$\hat{H}\sum_{i=1}^{N}[\delta\vec{\varphi}, \vec{r}_i]\nabla_i - \sum_{i=1}^{N}[\delta\vec{\varphi}, \vec{r}_i]\nabla_i\hat{H} = 0$$

$$\sum_{i=1}^{N}[\delta\vec{\varphi}, \vec{r}_i]\nabla_i = \sum_{i=1}^{N}\delta\varphi[\vec{r}_i, \vec{\nabla}_i] = \delta\vec{\varphi}\sum_{i=1}^{N}[r_i, \nabla_i] = \left[\frac{1}{i\hbar}[\vec{r}, i\hbar\nabla] \to \frac{1}{i\hbar}[\vec{r}, \vec{p}]\hbar \quad [\vec{r}, \vec{p}] = \hat{\vec{L}}\right] =$$

$$\delta\vec{\varphi}\,\frac{i}{\hbar}\sum_{k=1}^{N}[\vec{r}_k, \vec{p}_k] = \delta\vec{\varphi}\,\frac{i}{\hbar}\sum_{k=1}^{N}\hat{\vec{L}}_k$$

п.2 ***Свойства оператора момента импульса.***

$\hat{L} = [\vec{r}, \vec{p}]$

$\hat{L}_x = y\hat{p}_z - \hat{p}_y z$

$\hat{L}_y = z\hat{p}_x - \hat{p}_z x$

$\hat{L}_z = x\hat{p}_y - \hat{p}_x y$

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

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

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

$\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ нельзя измерить одновременно точно.

Результатом того, что операторы не коммутируют, является то, что они неизмеримы.

п.3 ***Оператор $\hat{L}$ в сферических координатах.***

$$\hat{L}^2 = [r, -i\hbar\nabla][r, -i\hbar\nabla] = r[-i\hbar\nabla[r, -i\hbar\nabla]] = -\hbar^2 r[\nabla[r, \nabla]]$$

$$\left[\begin{array}{l} [\;[r,\;]]\;(r) = [\;,[r,\;\;]] = [\;[r,\;\;] + \;[r,\;\;]] = \\ = (\;\;,\;)r - \;\;(\;,r) + r\;^2\; - (r,\;)\;\; = \\ = \;\; - 3\;\; + r^2\;\; - (r,\;)\;\; \end{array}\right]$$

$$\hat{L}^2 = [\vec{r},\vec{p}]^2 = -\hbar\vec{r}[\nabla[\vec{r},\nabla]]$$

$$\hat{\vec{L}}^2 = -\hbar^2\left\{-\vec{r}\nabla\psi r + r^2\Delta\psi - \vec{r}(\vec{r},\nabla)\nabla\right\} = -\hbar\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) - \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}$$

$$\Delta\Psi = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}) + \frac{1}{r^2}\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right\} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}) + \frac{1}{r^2}\Delta_{\theta\varphi}\psi$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\Delta_{\theta\varphi}$$

$$\Delta\Psi = \vec{e}_r\frac{\partial\psi}{\partial r} + \vec{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial\theta} + \vec{e}_\varphi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}$$

$$\hat{\vec{L}} = -i\hbar[\vec{r},\nabla] = -i\hbar[\vec{r},\vec{e}_r\frac{\partial\psi}{\partial r} + \vec{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial\theta} + \vec{e}_\varphi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}] =$$

$$= -i\hbar r[\vec{e}_r,\vec{e}_\theta]\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} - i\hbar r[\vec{e}_r,\vec{e}_\varphi]\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} = -i\hbar r(\vec{e}_\varphi\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \vec{e}_\theta\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi})$$

$$\hat{\vec{L}}_z(\vec{k},\hat{\vec{L}}) = -i\hbar(k,\vec{e}_\varphi)\frac{\partial}{\partial\theta} - i\hbar(k,\vec{e}_\theta)\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$\hat{\vec{L}}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

В квантовой механике оператор импульса:

1. $\hat{L} = [\vec{r},\vec{p}]$ $\qquad \hat{p} = -i\hbar\nabla$
2. $\hat{L}_i\hat{L}_k - \hat{L}_k\hat{L}_i = i\hbar\hat{L}$

п.4 ***Собственные функции и собственные значения*** $\hat{L}$.

$$\hat{\vec{L}}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$-i\hbar\frac{\partial\Phi(\varphi)}{\partial\varphi_i} = \mu\Phi(\varphi)$$

$$\Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi)$$

$$\frac{d\Phi}{d\varphi} = i\hbar\mu\Phi$$

$$\frac{d\Phi}{\Phi} = i\hbar\mu d\varphi$$

$$\ln\Phi(\varphi) = i\hbar\mu\varphi + \ln C$$

$$\Phi(\varphi) = Ce^{i\hbar\mu\varphi}$$

$$Ce^{i\hbar\mu(\varphi+2\pi)} = Ce^{i\hbar\mu\varphi}$$

$$e^{i\hbar\mu\varphi} = 1$$

$\cos \mu 2\pi + i\sin \mu 2\pi = 1$
$\cos \mu 2\pi = 1$
$\sin \mu 2\pi = 0$

$$\int_0^{2\pi} \Phi_m{}^*(\varphi)\Phi_m(\varphi)d\varphi = 1$$

$$|C|^2 \int_0^{2\pi} e^{-im\varphi} e^{im\varphi} d\varphi = 1$$

$$2\pi |C|^2 = 1 \qquad |C| = \frac{1}{2\pi}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} C = |C|e^{i\alpha} \\ C^* = |C|e^{-i\alpha} \end{array} \right\} \qquad |e^{\pm i\alpha}| = 1$$

$$\Phi_m(\varphi) = Ce^{im\varphi}$$
$$\Downarrow$$
$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$$

$$\hat{L}_x, \hat{L}_y : \begin{array}{l} [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x \neq 0 \\ [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar L_y \neq 0 \end{array} \qquad [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$$

Замечание: Полный набор физических величин.
Набор физических величин квантового числа, полностью характеризующих состояние в системе, называется полным набором.

$$\hat{\vec{L}}^2 = -\hbar\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} \right]$$

$$\hat{\vec{L}}^2 = -\hbar\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}) - \frac{\hbar^2}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

$$\hat{\vec{L}}^2 = -\hbar\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{\hat{L}_z^2}{\sin^2\theta}$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$$

$$\Psi(\theta,\varphi) = \Theta(\theta)\Phi_m(\varphi)$$

Так как L^2 и L_z коммутируют, то они имеют общую систему функций.

$$\hat{L}^2\Psi(\theta,\varphi) = \lambda\Psi(\theta,\varphi)$$

$$-\hbar^2\Phi_m(\varphi)\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\,\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\Phi_m(\varphi)\Theta(\theta) = \lambda\Phi\Theta$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}) + (\frac{\lambda}{\hbar^2} - \frac{m^2}{\sin^2\theta})\Theta(\theta) = 0$$

Полученное уравнение решают следующим образом:
а) замена переменных
$x = \cos\theta$

$$\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{dy}{dx}\right] + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-x^2}\right)y(x) = 0 \qquad -1 \le x \le 1$$

б) $m = 0$

$$\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{dy}{dx}\right]+\lambda y=0$$

$$y=\sum_{\nu=1}^{\infty} C_\nu x^\nu \qquad y(x)=P_l(x)$$

$$P_l(x)=\frac{1}{2^l l!}\frac{d^l(x^2-1)^l}{dx^l}$$

$$\int_{-1}^{+1} P_l^*(x)L_{l_1}(x)dx=\begin{cases}0, & l\neq l_1\\ \dfrac{2}{2l+1}, & l=l_1\end{cases} \qquad \lambda=l(l+1)$$

$$\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{dP_l(x)}{dx}\right]+l(l+1)P_l(x)=0$$

в) $\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{dy}{dx}\right]+[l(l+1)-\frac{m^2}{1-x^2}]y(x)=0$

Полученные решения должны удовлетворять неравенству:

$|m|\le l$

$P_l(x)=x^l+x^{l-1}+\ldots$

$-l,-l+1,\ldots,-2,-1,m,+1,+2,\ldots,+l$ $\quad m$ -магнитное квантовое число

l - орбитальное квантовое число

Если заданному значению энергии соответствует несколько состояний, то состояние заданной энергии называется вырожденным.

$P_l^{|m|}(x)=P_l^{|m|}(\cos\theta)$

$$\int[P_l^{|m|}(x)]^2=\frac{2}{2l+1}\frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!}$$

Квантовая теория простейших атомов.

Теория атома водорода.

1. Движение частиц в центрально-симметричном поле.

$$\begin{cases} m_1\dfrac{d^2\vec{r}_1}{dt^2}=-\dfrac{\partial U}{\partial \vec{r}_1}\\[2mm] m_2\dfrac{d^2\vec{r}_2}{dt^2}=-\dfrac{\partial U}{\partial \vec{r}_2}\end{cases}$$

$U=U(|r_1-r_2|)$

$$\begin{cases} M\dfrac{d^2\vec{R}}{dt^2} = 0 \\ \mu\dfrac{d^2\vec{r}}{dt^2} = -\dfrac{\partial U}{\partial r}\dfrac{\vec{r}}{r} \end{cases}$$

$$\vec{R} = \frac{m_1 r_1 + m_2 r_2}{m_1 + m_2}$$

$$\frac{dR}{dt} = \vec{V}_0 \Rightarrow \vec{R} = \vec{V}_0 t + \vec{R}_0$$

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2 + U(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

$$\hat{H}\Psi(r_1, r_2) = E\Psi(r_1, r_2)$$

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

$$H(p, q) = E$$

$$\hat{H}(\hat{p}, q)\Psi = E\Psi$$

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

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2\mu} + U(r)\right)\Psi(r) = E\Psi(r)$$

$$\hat{p}^2 = (-i\hbar\nabla)^2 = -\hbar^2\nabla^2 = -\hbar^2\Delta = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\Psi(\vec{r}) + U(r)\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$$

$\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\Psi(\vec{r}) + [E - U(r)\Psi(\vec{r}) = 0$ - уравнение Шрёдингера для электрона, движущегося в центрально-симметрическом поле.

$$\mu = \frac{m_e M_p}{m_e + M_p} = \frac{m_e}{1 + \dfrac{m_e}{M_p}} \qquad \frac{m_e}{M_p} \approx \frac{1}{1837} << 1$$

Если рассматриваем движение электрона, то

$$[\hat{H}, \hat{L}] = 0$$

$$0 = \frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{1}{\hbar}[\hat{H}, \hat{f}]$$

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = \hat{L}[\hat{H}, \hat{L}] + [\hat{H}, \hat{L}]\hat{L} = 0$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0 \qquad [\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$$

Операторы H, L_z, L^2 коммутируют между собой. Это означает, что энергия, импульс и проекция момента импульса на ось z сохраняется.

Таким образом, квантовые числа соответствующие этим операторам могут быть использованы для характеристики системы.

Из теоремы о том, что коммутирующие между собой операторы имеют общую систему собственных функций можно сказать, что собственные функции оператора энергии должны включать в себя как сомножители собственной функции оператора L^2 и собственной функции L_z.

$$\Psi(r,\theta,\varphi) = P_l^{(n)}(\cos\theta)e^{im\varphi}R(r)N$$

$$\frac{\hbar}{2\mu}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\varphi^2}\right]\right\}+[E-U(r)]\Psi(r,\theta,\varphi)=0$$

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right)-\frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2}\Psi+[E-U(r)]\Psi=0$$

$$\Psi(r,\theta,\varphi) = P_l^{(n)}(\cos\theta)e^{im\varphi}R(r)$$

$$\hat{L}^2\Psi(r,\varphi)=\hbar^2 l(l+1)\Psi(\theta,\varphi)$$

$$L^2=\hbar^2 l(l+1)$$

$$\hat{T}=\frac{\hat{L}^2}{2Y}$$

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\Psi_1(\theta,\varphi)\cdot\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)-R(r)\frac{\hat{L}^2\Psi_1(\theta,\varphi)}{2\mu}+[E-U(r)]R(r)\Psi_1(\theta,\varphi)=0$$

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+[E-U(r)-\frac{\hbar l(l+1)}{2\mu r^2}]R(r)=0$$

$$U(r)=-\frac{e^2}{r}$$

$$R(r)\xrightarrow[r\to+\infty]{}0$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\left[\frac{2\mu E}{\hbar^2}+\frac{2\mu e^2}{\hbar^2 r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R(r)=0$$

$E=\dfrac{mv^2}{2}+U(r)=\dfrac{mv^2}{2}-\dfrac{e^2}{r}>0$ - электрон улетит

$\dfrac{mv^2}{2}-\dfrac{e^2}{r}<0$ - электрон будет находиться вблизи атома.

$$E=-|E|$$

$$r=\frac{\rho}{\alpha}$$

$$\alpha^2\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho^2\frac{\partial R(\rho)}{\partial\rho}\right)+\left[\frac{2\mu e^2\alpha}{\hbar\rho}-\frac{2\mu|E|}{\hbar^2}-\frac{l(l+1)\alpha^2}{\rho^2\alpha^2}\right]R(\rho)=0$$

$$\frac{2\mu|E|}{\hbar^2\alpha^2}=\frac{1}{4} \qquad \alpha=\sqrt{\frac{8\mu|E|}{\hbar^2}}$$

$$\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho^2\frac{\partial R(\rho)}{\partial\rho}\right)+\left[\frac{\lambda}{\rho}-\frac{1}{4}-\frac{l(l+1)}{l^2}\right]R(\rho)=0$$

$$\lambda=\frac{2\mu E^2\hbar}{\hbar\sqrt{8\mu|E|}}=\frac{2\mu E^2}{\sqrt{8\mu|E|}}$$

$$E<0$$

$$\hat{H},\hat{L}^2,\hat{L}_z$$

$$\Psi(r,\theta,\varphi)=R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$$

$$r = \frac{\rho}{\alpha} \qquad \alpha = \sqrt{\frac{8m|E|}{\hbar^2}}$$

$$\lambda = \frac{\rho^2}{\hbar}\sqrt{\frac{h}{2|E|}}$$

$$|E| = \frac{e^4 m}{2\hbar^2}\frac{1}{\lambda^2}$$

$$\frac{d^2R(\rho)}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR(\rho)}{d\rho} + \left(\frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)R = 0$$

a) $\rho \to +\infty \qquad \frac{d^2R}{d\rho^2} = \frac{1}{4}R$

$$R(\rho) \approx e^{-\frac{\rho}{2}}$$

b) $\rho << 1$

$$\frac{1}{\rho^2}\frac{d}{d\rho}\left(\rho^2\frac{dR}{d\rho}\right) - \frac{l(l+1)}{\rho^2}$$

$$R(\rho) \approx e\rho^{\nu}$$

$$R(\rho) = \sum C_\nu \rho^\nu = C_\nu \rho^\nu (C_{\nu+1}\rho^{\nu+1} + \ldots)$$

$$C_\nu \nu(\nu+1)\rho^\nu - l(l+1)C_\nu \rho^\nu = 0$$

$$\nu^2 + \nu - l(l+1) = 0$$

$$\nu_{1,2} = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} + l^2 + l} = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{(l+\frac{1}{2})^2} = -\frac{1}{2} \pm \left(l + \frac{1}{2}\right)$$

$$\nu_1 = l$$

$$\nu_2 = -l - 1$$

$$R(\rho) = \rho^l e^{-\frac{\rho}{2}} L(\rho)$$

$$\rho^l e^{-\frac{l}{2}} = \frac{\rho^l}{e^{\frac{l}{2}}} = \frac{\infty}{\infty} = \frac{l!}{\left(\frac{1}{2}\right)^\rho e^{\frac{\rho}{2}}}$$

$$L(\rho) = \sum_{\nu=0}^{\infty} C_\nu \rho^\nu$$

$$\rho\frac{d^2L}{d\rho^2} + [2(l+1) - \rho]\frac{dL(\rho)}{d\rho} + (\lambda - l - 1)L(\rho) = 0$$

$$C_{\nu+1} = -\frac{\lambda - l - 1 + \nu}{(\nu+1)(2l+2+\nu)}C_\nu$$

$$\frac{C_{\nu+1}}{C_\nu} \xrightarrow[\nu\to\infty]{} \frac{\nu}{\nu^2} = \frac{1}{\nu}$$

$$e^\rho = 1 + \frac{1}{1!}\rho + \frac{1}{2!}\rho^2 + \frac{1}{3!}\rho^3 + \ldots + \frac{1}{\nu!}\rho^\nu + \frac{1}{(\nu+1)!}\rho^{\nu+1} + \ldots$$

$$\frac{C_{\nu+1}}{C_\nu} = \frac{1}{\nu+1} \approx \frac{1}{\nu}$$

При больших ν $\quad \sum_\nu C_\nu \rho^\nu \approx e^\rho$

Вывод: при больших ν ряд соответствующий $L(\rho)$ ведёт себя как e^ρ .

$R(\rho) \approx \rho^{l} e^{\frac{\rho}{2}} \xrightarrow[\rho \to +\infty]{} \infty$

$\Psi(r,\theta,\varphi)$: соответственно $R(\rho)$

Чтобы функция была конечна, необходимо, чтобы ряд обрывался.

При $\nu = n_r = n - l - 1 \Rightarrow \lambda = n$

n_r -радиальное квантовое число.

$$\sum_{\nu=0}^{n_r} C_\nu r^\nu = L_{n-l-1}$$

$l = 0,1,2,\ldots$

Для *l=0*

$$\rho \frac{d^2 L(\rho)}{d\rho} + (1-\rho)\frac{dL(\rho)}{d\rho} + \frac{n+1}{p} L(\rho) = 0$$

$$\rho \frac{d^2 L(\rho)}{d\rho} + (1-\rho)\frac{dL(\rho)}{d\rho} + pL(\rho) = 0$$

$$\rho \frac{d^2 L^{(s)}(\rho)}{d\rho} + (s+1-\rho)\frac{dL^{(s)}(\rho)}{d\rho} + (p-s)L^{(s)}(\rho) = 0$$

Полиномы Лагерра

$$L_r^{(s)}(\rho) = \frac{d^{(s)} L_{n_r}}{d\rho^{(s)}}$$

$s = 2l + 1$

$\lambda - l - 1 = p$

$n = n - l - 1 = n + l$

$L_{n+l}^{(2l+1)}(\rho)$ - обобщённый полином Лагерра.

<u>Заключение</u>:

$L_{n+l}^{(2l+1)}(\rho)$

$R_{nl}(\rho) = p^l e^{-\frac{\rho}{2}} L_{n+l}^{(2l+1)}(\rho)$ - радиальная функция.

$n = l$

$$|E| = \frac{e^4 \mu}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}$$

Энергия энергетического уровня с номером n.

$$E_n = -\frac{ne^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}$$

Совпадение данного результата с Боровским, есть результат зависимости потенциальной энергии следующего вида: $U = -\dfrac{e^2}{r}$

Первый Боровский радиус: $a_0 = \dfrac{\hbar^2}{2me^r}$

$$R_{10} = \left(\frac{z}{a_0}\right) 2e^{-\frac{r\cdot z}{a_0}} \qquad z \neq 1$$

$$R_{20} = \left(\frac{z}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(2 - \frac{zr}{a_0}\right)e^{-\frac{r\cdot z}{a_0}}$$

$$R_{21} = \left(\frac{z}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{zr}{a_0\sqrt{3}}\right) e^{-\frac{r\cdot z}{a_0}}$$

$$\hat{\vec{M}} = -\frac{e^2}{2\mu \cdot l}\hat{L}$$

$$\hat{M}_z = -\frac{e}{2\mu \cdot l}\hat{L}_z = -\frac{e}{2\mu \cdot l} m\hbar$$

$$E_n \to \sum_{0}^{n-1} \sum_{m=1}^{l} m = \sum_{l=0}^{n} (2l+1)n^2$$

Объекты, описываемые моделью:

1. ионизированные атомы (однократно ионизированный гелий, серия Пикерена)
2. мюонный, позитронный и т.д.
3. оценка атомов примесей полупроводников.
4. водородоподобные атомы.

$$z^* = ze - e\int_0^z n(z)dV$$

$$z^* \xrightarrow[z\to 0]{} (ez) \qquad z^* \xrightarrow[i\to 0]{} e$$

Когда строим периодическую систему Менделеева, каждому квантовому числу соответствует 2 состояния:

$$\hat{\mu} = -\frac{e}{m_e c}s_z$$

$$s_z = \pm\frac{\hbar}{2}$$

Атом водорода (продолжение).

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\Psi(r,\theta,\varphi) + [E - U(r)]\Psi(r,\theta,\varphi) = 0 \qquad U = -\frac{e^2}{r}$$

$$\Psi(r,\theta,\varphi) = N_{nl}R_{nl}(r)P_l^{|n|}(\cos\theta)e^{im\varphi}$$

$$\begin{cases} n = 1,2,3,\ldots \\ l = 1,2,3,\ldots n-1 \\ m = 0,\pm 1,\pm 2,\ldots \pm l \end{cases}$$

Экспериментально доказали, что n, l, m - двойные.

$$\sum_{l=1}^{n-1}(2l+1) = n^2 \qquad \hat{s}_z = \pm\frac{\hbar}{2}$$

$$\mu_z = \pm\frac{e\hbar}{2m_e c}$$

$$l \neq 0 \qquad \hat{M} = -\frac{e}{2m_e c}\hat{\vec{L}}$$

$$\mu_{zp} = \frac{e\hbar}{2m_p c} \qquad L_z = m\hbar, m = 0;\pm 1;\pm 2;\ldots$$

$$H = \frac{3(M,r)r - Hr^2}{r^5} \approx \frac{M}{r^3}$$

$$\Delta U = -(\vec{\mu}_z, \vec{H}) \approx \frac{\mu_{ez} M}{r^3} \approx \frac{\mu_{ez} M}{a^3}$$, где a- первый радиус Боровский орбиты.

$$E_{nlms_z} = E^{(0)}_{nlms_z} + W_{nlms_z, nlms_z}$$

$$W = -\mu_z H \pm \frac{eA}{2m_e c} \cdot \hbar m, m = 0; \pm 1; \dots$$

$$W \approx \pm \frac{e\hbar^2}{2m_e} \cdot m$$

$$E = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} \approx (\vec{\hat{L}}\vec{\hat{S}})$$

$$\hat{Y} = \hat{L} + \hat{S}$$

Вывод: с учётом взаимодействия спина с орбитальным магнитным моментом получаем, что квантовые числа m и l относятся к величинам, которые не являются интегралами движений.

$$\hat{Y} = \hat{L} + \hat{S}$$

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

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

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

$$[\hat{Y}^2, \hat{Y}_z] = [\hat{Y}^2, \hat{Y}_y] = [\hat{Y}^2, \hat{Y}_x] = 0$$

$$\hat{Y}_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z$$

$$L_z = m\hbar \quad m = 0; \pm 1; \pm 2; \dots \pm l$$

$$s_z = \pm \hbar$$

$$|\hat{Y}_z| = |\hat{L}_z + \hat{S}_z|$$

$$Y^2 = \hbar^2 j(j+1)$$

$$\hat{L}_z = m\hbar, \; m = 0; \pm 1; \pm 2; \dots \pm l$$

$$\hat{Y}_z = mj\hbar, \; m = \pm \frac{1}{2}; \pm \frac{3}{2}; \pm \frac{5}{2}; \dots \pm (l \pm \frac{1}{2})$$

$$n, l, m, s_z$$

$$\Downarrow$$

$$n, j, m_j, s_z$$

СПИН ЭЛЕКТРОНА

Экспериментальное обоснование существования спина.

3 классических вывода:

1) Дуплетный спектр щелочных металлов.

$$E_{n-l+m} + \Delta E \Rightarrow E_{n-l+m} \pm \frac{eM\hbar}{2mc}$$

$$U = -\mu_z M = \frac{eH}{m_z c} s_z \pm \frac{eH\hbar}{2m_e c}$$

$$\hat{\mu}_z = \frac{e}{mc}$$

$$L = [R_c, m \cdot V_c] + \sum_n [r_n, p_n]$$

$$L = \hbar\sqrt{l(l+1)}$$

$$s = \pm\frac{1}{2}\hbar$$

$$s = \sqrt{\frac{3}{4}}\hbar$$

$$l = 1$$

$$L = \hbar\sqrt{3}$$

$$\vec{y} = \hat{L} = [R, \hat{P}] + \hat{S}$$

2) Опыт Эйнштейна и де Гааза.

$$M = -\frac{e}{2m_e c}\vec{L}$$

$$\frac{d^2\varphi}{dt^2} + \frac{K}{Y}\varphi_0 = 0$$

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{R}{Y}}$$

$$M_z = \sum M_z = \sum \frac{e}{m_l e} s_z$$

3) Опыты Этерна и де Гааза на серебре.

$$L = \hbar\sqrt{l(l+1)} \qquad l = 0$$

$$M_z = \frac{e}{m_\alpha e} s_z$$

Принцип тождественности элементарных частиц. Следствия из него.

1. Принцип тождественности.

<u>Одинаковые частицы принципиально неразличимы.</u>

2. Оператор перестановки частиц. Его собственные значения и собственные функции.

Оператор перестановки – оператор, который переставляет частицы местами.

$$\hat{P}_{12}\Psi(r_1, r_2) = \Psi(r_2, r_1)$$

$$\hat{P}_{12}\Psi(r_1, r_2) = \lambda\Psi(r_1, r_2)$$

$$\hat{P}_{12}\Psi(r_1, r_2) = \hat{P}_{12}\hat{P}_{12}\Psi(r_2, r_1) = \hat{P}_{12}\lambda\Psi(r_1, r_2) = \lambda P_{12}\Psi(r_1, r_2) = \lambda^2\Psi(r_1, r_2)$$

$$\lambda^2 = 1$$

$$\lambda_{1,2} = \pm 1$$

$$\Psi(r_1, r_2, \ldots, r_N)$$

$$P_{ik}\Psi(r_1, r_2, \ldots, r_i, \ldots, r_k, \ldots r_N) = \Psi(r_1, r_2, \ldots, r_k, \ldots, r_i, \ldots r_N)$$

$$\frac{\partial \hat{P}_{ik}}{\partial t} = 0$$

$$\hat{P}_{ik}\Psi = +\Psi$$

$$\hat{P}_{ik}\Psi = -\Psi \qquad \hat{P}_{ik}\hat{H}\Psi = E\hat{P}_{ik}\Psi$$

$$\hat{H}\hat{P}_{ik}\Psi = E\hat{P}_{ik}\Psi$$

$$\frac{d\hat{f}}{dt} = \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{f}]$$

$$\hat{H}\hat{P}_{ik} - \hat{P}_{ik}\hat{H} = 0$$

Поскольку оператор перестановки частиц коммутировал с гамильтонианом частиц, то его собственное значение остаётся постоянным.

Волновые функции, которые относятся к $\lambda = +1$ называются симметричными, а которые к $\lambda = -1$ - антисимметричными.

Для антисимметричных частиц $s = \frac{1}{2}\hbar; \frac{3}{2}\hbar; \ldots$ (фермионы)

Если спин целочисленный, то бозоны.

3. Принцип Паули.

Пусть система состоит из двух частиц, электроны, взаимодействием между которыми можно пренебречь.

Уравнение Шрёдингера для каждого из электронов:

$$\hat{H}_0 \Psi_n(r_i) = E_n \Psi_n(r_i) \qquad i = 1,2$$

Волновая функция:

$$\Psi_{n1n2}(r_1, r_2) = \Psi_{n1}(r_1)\Psi_{n2}(r_2)$$

Проверим это:

$$(\hat{H}_1 + \hat{H}_2)\Psi_{n1n2} = \hat{H}_1\Psi_{n1n2} + \hat{H}_2\Psi_{n1n2} = \hat{H}_1\Psi_{n1}\Psi_{n2} + \hat{H}_2\Psi_{n1}\Psi_{n2} =$$

$$= \hat{E}_{n1}\Psi_{n1}\Psi_{n2} + \hat{E}_{n2}\Psi_{n1}\Psi_{n2} = (E_{n1} + E_{n2})\Psi_{n1,n2}$$

$$\Psi(r_1, r_2) = \sum_{n1}\sum_{n2} C(n_1, n_2)\Psi_{n1}(r_1)\Psi_{n2}(r_2)$$

$$P_{12}\Psi(r_1, r_2) = -\sum_{n1}\sum_{n2} C(n_1, n_2)\Psi_{n1}(r_1)\Psi_{n2}(r_2)$$

$$\hat{P}_{12}\Psi(r_1, r_2) = \sum_{n1,n2} C(n_1, n_2)\Psi_{n1}(r_2)\Psi_{n2}(r_1) = \sum_{n1,n2} C(n_1, n_2)\Psi_{n2}(r_2)\Psi_{n1}(r_1)$$

$$C(n_2, n_1) = -C(n_1, n_2)$$

$$n_1 = n_2 = n$$

$$C(n,n) = -C(n,n)$$

$$C(n,n) = 0$$

$$|C(n_1, n_2)|^2 = \omega_{n1n2}$$

$\omega_{n1n2} = 0$ Событие невозможное в трактовке теории вероятности.

Вероятность обнаружения системы в состоянии: когда оба электрона находятся в одном и том же состоянии равна

$$|C(n,n)|^2 = 0$$

Отсюда следует принцип Паули: В каждом квантовом состоянии может находиться не более одного электрона.

Рассмотрение проведено для двух фермионов, но оно может быть распространено на любое конечное число элементарных частиц.

Элементы теории представлений.

$$\hat{f}\Psi_n = f_n\Psi_n$$

$$\hat{g}\Psi = \lambda\Psi(x) \qquad (\hat{H}\Psi = E\Psi)$$

Операторы $\hat{f}, \hat{g}$ относятся к одной системе.

$$\Psi(x) = \sum_n C_n\Psi_n(x)$$

С математической точки зрения мы $\Psi(x)$ раскладываем в ряд по $\Psi_n(x)$.

$$\int \Psi_m{}^*(x)\Psi(x)dx = \sum_n C_n \int \Psi_m{}^*(x)\Psi(x)dx = \sum_n C_n\delta_{mn} = C_m$$

$$\hat{g}\sum_n C_n\Psi_n(x) = g\sum_n C_n\Psi(x)$$

$$\sum_n \int \Psi_m^* \hat{g} C_n \Psi_n(x)dx = g\sum_n C_n \int \Psi_m^* \Psi\, dx$$

$$g_{mn} = \int \Psi_m^*(x)\hat{g}\Psi_n(x)dx$$

$$\sum_n g_{mn}\cdot C_n = \sum_n gC_n g_{mn}$$

$$\sum_n (g_{mn} - g\delta_{mn})C_n = 0$$

g_{mn} -матрица оператора g.

$$\{g_{mn}\} = \left\{\int \Psi_m^* \hat{g}\Psi_n dx\right\}$$

$$(g_{00} - g)C_0 + g_{01}C_1 + g_{02}C_2 + \ldots = 0$$

$$g_{01}C_0 + (g_{11} - g)C_1 + g_{12}C_2 + \ldots = 0$$

$$\det(g_{ik} - g\delta_{ik}) = 0$$

Оператор $\hat{g}$ в $\hat{f}$ представлении. (матрица с элементами g_{mn})

Элементы теории возмущения.

$$\hat{H}_0\Psi_m(x) = E_{0m}\Psi_m(x)$$

$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}$ $\qquad \hat{W} = \lambda\hat{\omega}$ $\qquad \lambda$ -очень маленькая величина.

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

$$\Psi(x) = \sum C_n\Psi_m(x)$$

$$C_n = C_n^{(0)} + C_n^{(1)}\lambda + C_n^{(2)}\lambda^2 + \ldots$$

$$E = E^{(0)} + E^{(1)}\lambda + E^{(2)}\lambda^2 + \ldots$$

$$\sum_n (H_{0mn} + \lambda\omega_{mn} - E\delta_{mn})C_n = 0$$

$$H_{0mn} = \int \Psi_m^*(x)\hat{H}_0\Psi_m(x)dx$$

$$\omega_{mn} = \int \Psi_m^*(x)\hat{W}\Psi_n(x)dx = \lambda\omega_{mn}$$

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 0, m \neq n \\ 1, m = n \end{cases}$$

$$\hat{H}_0\sum C_n\Psi_n + \hat{W}\sum \Psi_n(x) = E\sum C_n\Psi_n(x)$$

$$\sum_n \left[E_{0m}\delta_{mn} + \lambda\omega_{mn} - \left(E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \ldots\right)\right]\cdot\left(C_n^{(0)} + \lambda C_n + \lambda^2 C_n^{(2)} + \ldots\right)$$

Возьмём нулевой порядок возмущения.

$$\begin{cases} E^{(0)} = E_{0m} \\ C_m^{(0)} = 1; C_n^{(0)} = 0, (n \neq m) \end{cases}$$

Физический смысл: Если нет возмущения, то $E^{(0)} = E_{0m}$, а волновая функция для m состояния та же самая.
Пусть учитываем это возмущение:

$$\begin{cases} E^{(1)} = V_{mn}, m = n \\ C_m^{(1)} = \dfrac{V_{mn}}{E_{0n} - E_{0m}}, m \neq n \end{cases}$$

$$\Psi_n(x) = \sum_n C_n^{(1)} \Psi_n(x), n \neq m$$

Атом гелия.

$$E_n = \frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}$$

$$\left\{ E_n = -\frac{me^2 z^2}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} \right\} \qquad \begin{array}{l} n = 1,2,3,... \\ l = 0,1,2,3,...n-1 \\ m = 0;\pm 1;\pm 2;\pm 3;...\pm l \end{array}$$

$$n \to n^2$$

1)Поправка на спин.

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} \approx -\frac{m_e M_e}{m_e + M_p}\frac{e^4}{2\hbar^2 n^2} = \frac{m_e}{1 + \dfrac{m_e}{M_p}}\frac{e^4}{2\hbar^2 n^2} = \frac{m_e M_p e^4}{2\hbar^2 n^2}\left(1 - \frac{m_e}{M_p}\right)$$

$$m_e \approx \frac{m_e}{\sqrt{1 - \dfrac{V^2}{c^2}}}$$

Тонкая структура спектров.
В строгой теории, когда рассматривается релятивистское уравнение на уравнении Дирака, спин появляется автоматически.
2)учёт $\hat{\mu}_p$ - сверхтонкая структура.

$$\vec{\hat{\mu}}_p = \frac{\vec{e}}{\mu_p}\vec{\rho}$$

$$F = G\frac{m_e M_p}{r^2}$$

$$F_k = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}$$

3)Лэмбовский сдвиг $\approx$ 4 Å.

П.1 Качественная теория атома гелия.

$$\hat{H} = -\frac{\hbar}{2M_я}\nabla_я^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_z^2 - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}}$$

$$\hat{H} = H_{01} + H_{02}$$

$$H_{01} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{2e^2}{r_1}$$

$$H_{02} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_2^2 - \frac{2e^2}{r_2}$$

$$\Psi_{n1,n2}(r_1, r_2) = \Psi_{n1}(r_1)\Psi_{n2}(r_2)$$

Введём спиновые функции:

$$S_\alpha\left(+\frac{\hbar}{2}\right): \begin{cases} 1, \sigma: +\frac{1}{2} \\ 0, \sigma: -\frac{1}{2} \end{cases}$$

$$S_\beta\left(-\frac{\hbar}{2}\right): \begin{cases} 1, \beta: -\frac{1}{2} \\ 0, \beta: \frac{1}{2} \end{cases}$$

$$\Psi(r_1, r_2, \hat{s}_{1z}, \hat{s}_{2z}) = \Phi(r_1, r_2)\cdot S(s_{1z}, s_{2z})$$

$$\Psi(r_2, r_1, \hat{s}_{2z}, \hat{s}_{1z}) = \Phi(r_2, r_1)\cdot S(s_{1z}, s_{2z}) = -\Psi(r_1, r_2)S(s_{1z}, s_{2z})$$

1. $\Phi_a(r_1, r_2) = -\Phi_a(r_2, r_1)$

$S_s(s_{1z}, s_{2z}) = S_s(s_{2z}, s_{1z})$

2. $\Phi_s(r_1, r_2) = \Phi_s(r_2, r_1)$

$S_a(s_{1z}, s_{2z}) = -S_a(s_{2z}, s_{1z})$

$$S(\sigma_{1z}, \sigma_{2z}) = S_\alpha(\sigma_{1z})S_\beta(\sigma_{2z})$$

$$\sigma_{1z}, \sigma_{2z} = \pm\frac{\hbar}{2}$$

Синглет $S_a = \frac{1}{2}\left[S_{\frac{1}{2}}(\sigma_{2z})S_{-\frac{1}{2}}(\sigma_{1z}) - S_{-\frac{1}{2}}(\sigma_{1z})S_{\frac{1}{2}}(\sigma_{2z})\right]$

$$\Leftarrow \Phi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_{n1}(\vec{r}_1)\Psi_{n2}(\vec{r}_2) + \Psi_{n2}(\vec{r}_2)\Psi_{n2}(\vec{r}_1)]$$

$$S_{\frac{1}{2}}(\sigma_{2z})S_{-\frac{1}{2}}(\sigma_{1z}) - S_{-\frac{1}{2}}(\sigma_{2z})S_{\frac{1}{2}}(\sigma_{1z})$$

$S^+S = 1$ $\left.\begin{array}{l} |N|^2 2 = 1 \\ |N| = \frac{1}{2} \end{array}\right]$ нормирующий множитель

$$
\text{Триплет}\begin{cases}
S_s' = S_{\frac{1}{2}}(\sigma_{1z})S_{\frac{1}{2}}(\sigma_{2z}) \\
S_s'' = S_{-\frac{1}{2}}(\sigma_{1z})S_{\frac{1}{2}}(\sigma_{2z}) \\
S_s''' = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[S_{\frac{1}{2}}(\sigma_{1z})S_{-\frac{1}{2}}(\sigma_{2z}) + S_{-\frac{1}{2}}(\sigma_{1z})S_{\frac{1}{2}}(\sigma_{2z})\right]
\end{cases}
$$

$$
\Leftarrow \Phi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_{n1}(\vec{r}_1)\Psi_{n2}(\vec{r}_2) - \Psi_{n1}(\vec{r}_2)\Psi_{n2}(\vec{r}_1)]
$$

Каковы энергетические уровни?

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

$\{\hat{W}\} \qquad \Delta E = W_{nn}$

$\hat{H} = \hat{H}_{10} + \hat{H}_{20} + \hat{W} \qquad \int \Phi_s^* \hat{W} \Phi_s dr_1 dr_2$

$$\int \Phi_a^* \hat{W} \Phi_a dr_1 dr_2$$

Для симметричной волновой функции:

$$E = E_{10} + E_{20} + K + A$$

Для антисимметричной волновой функции

$$E = E_{10} + E_{20} + K - A$$

$$K = \int |\Psi_{n1}(\vec{r}_1)|^2 |\Psi_{n2}(\vec{r}_2)|^2 \frac{e^2}{r_1} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

$$A = \int \Psi_{n1}^*(\vec{r}_2)\Psi_{n2}(\vec{r}_1)\frac{e^2}{r_{12}}\Psi_{n2}^*(\vec{r}_1)\Psi_{n1}(\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЕ БИЛЕТЫ

АмГУ

Утверждено на заседании кафедры	Кафедра ТиЭФ
«_____»_________________200 г.	Факультет ИФФ
Зав. кафедрой	Курс 3
Утверждаю:	Дисц. Квантовая механика

БИЛЕТ № 1

1. Уравнение движения в квантовой механике.
2. Статистическое толкование волн де Бройля.
3. Определение самосопряженного оператора.

АмГУ

Утверждено на заседании кафедры	Кафедра ТиЭФ
«_____»_________________200 г.	Факультет ИФФ
Зав. кафедрой	Курс 3
Утверждаю:	Дисц. Квантовая механика

БИЛЕТ 2

1. Гармонический осциллятор.
2. Волны де Бройля. Групповая скорость.
3. Основные свойства собственных функций.

АмГУ

Утверждено на заседании кафедры	Кафедра ТиЭФ
«_____»_________________200 г.	Факультет ИФФ
Зав. кафедрой	Курс 3
Утверждаю:	Дисц. Квантовая механика

БИЛЕТ 3

1. Движение в поле центральной силы.
2. Теория Бора. Трудности классической физики. Постоянная Планка. Энергия и импульс световых квантов.
3. Определение линейного оператора.

АмГУ

Утверждено на заседании кафедры	Кафедра ТиЭФ
«_____»_________________200 г.	Факультет ИФФ
Зав. кафедрой	Курс 3
Утверждаю:	Дисц. Квантовая механика

БИЛЕТ 4

1. Движение в кулоновском поле.
2. Вероятность нахождения микрочастицы.
3. Соотношение неопределенностей.

АмГУ

Утверждено на заседании кафедры	Кафедра ТиЭФ
«_____»_________________200 г.	Факультет ИФФ
Зав. кафедрой	Курс 3
Утверждаю:	Дисц. Квантовая механика

БИЛЕТ 5

1. Описание атома водорода.
2. Линейные самосопряженные операторы.
3. Вероятность импульса микрочастицы.

АмГУ

Утверждено на заседании кафедры	Кафедра ТиЭФ
«_____»_________________200 г.	Факультет ИФФ
Зав. кафедрой	Курс 3
Утверждаю:	Дисц. Квантовая механика

БИЛЕТ 6

1. Квантовые уровни двухатомной молекулы.
2. Среднее значение величины.
3. Значение нормировки волновой функции.

АмГУ

Утверждено на заседании кафедры — Кафедра ТиЭФ
«_____»_________________200 г. — Факультет ИФФ
Зав. кафедрой — Курс 3
Утверждаю: — Дисц. Квантовая механика

БИЛЕТ 7

1. Движение электронов в периодическом поле.
2. Условия возможности одновременного измерения разных механических величин.
3. Унитарное преобразование(понятие). Унитарное преобразование от одного момента времени к другому. Матрица рассеяния.

АмГУ

Утверждено на заседании кафедры — Кафедра ТиЭФ
«_____»_________________200 г. — Факультет ИФФ
Зав. кафедрой — Курс 3
Утверждаю: — Дисц. Квантовая механика

БИЛЕТ 8

1. Описание атома водорода.
2. Операторы: координаты импульса и момента импульса микрочастицы.
3. Значени ортогональности волновой функции.

АмГУ

Утверждено на заседании кафедры — Кафедра ТиЭФ
«_____»_________________200 г. — Факультет ИФФ
Зав. кафедрой — Курс 3
Утверждаю: — Дисц. Квантовая механика

БИЛЕТ 9

1. Уравнение Шредингера и зависимость операторов от времени в матричной форме.
2. Интегралы движения.
3. Гейзенберговское представление. Представление взаимодействия.

АмГУ

Утверждено на заседании кафедры — Кафедра ТиЭФ
«_____»_________________200 г. — Факультет ИФФ
Зав. кафедрой — Курс 3
Утверждаю: — Дисц. Квантовая механика

БИЛЕТ 10

1. Среднее значение функций. Понятие ансамблей в квантовой механике.
2. Различные представления операторов.
3. Общий метод вычисления вероятностей результатов измерения.

АмГУ

Утверждено на заседании кафедры — Кафедра ТиЭФ
«_____»_________________200 г. — Факультет ИФФ
Зав. кафедрой — Курс 3
Утверждаю: — Дисц. Квантовая механика

БИЛЕТ 11

1. Оператор энергии и функции Гамильтона. Гамильтониан.
2. Принцип суперпозиции состояний.
3. Основные свойства собственных функций.

АмГУ

Утверждено на заседании кафедры — Кафедра ТиЭФ
«_____»_________________200 г. — Факультет ИФФ
Зав. кафедрой — Курс 3
Утверждаю: — Дисц. Квантовая механика

БИЛЕТ 12

1. Собственные значения и собственные функции операторов. Квантование.
2. Вероятность импульса микрочастицы.
3. Производные операторов по времени.

АмГУ

Утверждено на заседании кафедры — Кафедра ТиЭФ
«_____»_________________200 г. — Факультет ИФФ
Зав. кафедрой — Курс 3
Утверждаю: — Дисц. Квантовая механика

БИЛЕТ 13

1. Изменение состояния по времени: уравнение Шредингера, сохранение числа частиц, стационарное состояние.
2. Матрицы. Действия над ними. Определение среднего значения оператора в матричной форме.
3. Гармонический осциллятор.

АмГУ

Утверждено на заседании кафедры — Кафедра ТиЭФ
«_____»_________________200 г. — Факультет ИФФ
Зав. кафедрой — Курс 3
Утверждаю: — Дисц. Квантовая механика

БИЛЕТ 14

1. Операторы: координаты импульса и момента импульса микрочастицы.
2. Волны де Бройля. Групповая скорость.
3. Различные значения операторов.

АмГУ

Утверждено на заседании кафедры — Кафедра ТиЭФ
«_____»_________________200 г. — Факультет ИФФ
Зав. кафедрой — Курс 3
Утверждаю: — Дисц. Квантовая механика

БИЛЕТ 15

1. Движение в кулоновском поле.
2. Теория Бора. Трудности классической физики. Постоянная планка. Энергия и импульс световых квантов.
3. Смысл квадрата модуля волновой функции.

АмГУ

Утверждено на заседании кафедры — Кафедра ТиЭФ
«_____»_________________200 г. — Факультет ИФФ
Зав. кафедрой — Курс 3
Утверждаю: — Дисц. Квантовая механика

БИЛЕТ 16

1. Собственный механический и магнитный моменты электрона (спин)
2. Расщепление спектральных линий в электрическом поле.
3. Полевые операторы.
4.

АмГУ

Утверждено на заседании кафедры — Кафедра ТиЭФ
«_____»_________________200 г. — Факультет ИФФ
Зав. кафедрой — Курс 3
Утверждаю: — Дисц. Квантовая механика

БИЛЕТ 17

1. Оператор спина электрона.
2. Временные функции Грина.
3. Теория возмущений. Постановка вопроса.

АмГУ

Утверждено на заседании кафедры — Кафедра ТиЭФ
«_____»_________________200 г. — Факультет ИФФ
Зав. кафедрой — Курс 3
Утверждаю: — Дисц. Квантовая механика

БИЛЕТ 18

1. Спиновые функции
2. Расщепление спектральных линий в электрическом поле.
3. Физическая интерпретация функций Грина.

АмГУ

Утверждено на заседании кафедры Кафедра ТиЭФ
«_____»__________________200 г. Факультет ИФФ
Зав. кафедрой Курс 3
Утверждаю: Дисц. Квантовая механика

БИЛЕТ 19

1. Уравнение Паули.
2. Расщепление спектральных линий атлома водорода в электрическом поле.
3. Физическая интерпретация функций Грина.

АмГУ

Утверждено на заседании кафедры Кафедра ТиЭФ
«_____»__________________200 г. Факультет ИФФ
Зав. кафедрой Курс 3
Утверждаю: Дисц. Квантовая механика

БИЛЕТ 20

1. Возмущение в случае отсутствия вырождения.
2. Расщепление спектральных линий в слабом магнитном поле.
3. Одночастичная функция Грина.

АмГУ

Утверждено на заседании кафедры Кафедра ТиЭФ
«_____»__________________200 г. Факультет ИФФ
Зав. кафедрой Курс 3
Утверждаю: Дисц. Квантовая механика

БИЛЕТ 21

1. Движение спина в переменном магнитном поле.
2. Расщепление уровней в случае двух кратного вырождения.
3. Матричные элементы гамильтониана.

АмГУ

Утверждено на заседании кафедры Кафедра ТиЭФ
«_____»__________________200 г. Факультет ИФФ
Зав. кафедрой Курс 3
Утверждаю: Дисц. Квантовая механика

БИЛЕТ 22

1. Свойства полного момента импульса.
2. Теория возмущений для непрерывного спектра.
3. Матричные элементы гмильтониана.

АмГУ

Утверждено на заседании кафедры	Кафедра ТиЭФ
«_____»__________________200 г.	Факультет ИФФ
Зав. кафедрой	Курс 3
Утверждаю:	Дисц. Квантовая механика

БИЛЕТ 23

1. Возмущение в случае отсутствия вырождения.
2. Энергетическая плотность состояний.
3. Функция Грина для одноэлектонного уравнения Шредингера.

.