МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Амурский государственный университет»
Кафедра «Физики»

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЙ КОМПЛЕКС ДИСЦИПЛИНЫ

«Квантовая теория»

Специальности 010701 – «Физика»

Благовещенск 2012

УМКД разработан: доц. кафедры физики, канд.физ.-мат. наук , Котов Е.А.

____

____

И.о. зав. кафедрой ____________________ /И.А.Голубева/

Протокол заседания кафедры № _____ от «____» ________________ 2012 г.

СОГЛАСОВАНО:

Протокол заседания УМСС

№ ______ от «____» ________________ 2012 г.

Председатель УМСС ______________ / Е.А. Ванина /

Содержание УМКД:

I. МЕТОДИЧЕСКИЙ РАЗДЕЛ

1.1Аннотация учебной дисциплины «Квантовая теория»

1.Цели и задачи дисциплины

Цель изучения дисциплины «Квантовая теория»: получить представление о современной физической теории как обобщении наблюдений, практического опыта и эксперимента, об особенностях поведения и описания движения объектов микромира.

Задачами дисциплины являются: формирование понятийно-терминологической базы квантово-механического описания движения материальных объектов; изучение основных законов квантовой теории; овладение методами и приемами решения задач в указанной предметной области.

2.Требования к уровню освоения дисциплины

В результате изучения дисциплины студент должен:

знать теоретические основы (понятия, законы, модели) квантовой механики;

уметь понимать, излагать и критически анализировать базовую физическую информацию в указанной предметной области; 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 и оценивать полученные результаты; строить и использовать для изучения этих моделей доступный ему математический аппарат, включая методы вычислительной математики.

владеть методами обработки и анализа экспериментальной и теоретической физической информации, использовать при работе справочную и учебную литературу, находить другие необходимые источники информации и работать с ними.

3.Содержание дисциплины. Основные разделы

Дуализм явлений микромира, дискретные свойства волн, волновые свойства частиц. Принцип неопределенностей. Принцип суперпозиции. Чистые и смешанные состояния. Эволюция состояний и физических величин. Соотношения между классической и квантовой механикой. Теория представлений. Общие свойства одномерного движения гармонического осциллятора. Туннельный эффект. Квазиклассическое движение. Теория возмущений. Теория момента. Движение в центрально-симметричном поле. Спин. Принцип тождественности одинаковых частиц. Релятивистская квантовая механика. Атом. Периодическая система элементов Менделеева. Химическая связь, молекулы. Квантование электромагнитного поля. Общая теория переходов. Вторичное квантование, системы с неопределенным числом частиц. Теория рассеяния.

1.2 Рабочая программа

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целями освоения дисциплины «Теоретическая физика» «Квантовая теория» (цикл «Общие профессиональные дисциплины») являются:

1. Представить физическую теорию как набор аксиоматических положений, не противоречащих друг другу и на их основе сформулировать математическую модель. Рассматривая явления микромира в рамках такой модели получить численные значения физических величин и провести сравнение с экспериментальными данными.
2. На основе сравнения положений квантовой механики с классической физикой показать коренное отличие в подходах к описанию физических явлений. Анализируя квантовые явления продемонстрировать невозможность применения методов классической физики для их описания. В рамках квантовой теории дать изложение основных законов и применить их к описанию атомов и молекул, периодической таблицы Менделеева, магнитного момента и спина, эффекта Зеемана. С учетом положений СТО на базе уравнения Дирака дать описание релятивистского движения электрона и продемонстрировать предсказательную силу такого уравнения.
3. Сформировать у студента представление о границах применимости квантовой механики. Дать представление о возникающих новых философских и методологических проблемах и возможных путях их решения.

Задачи дисциплины:

1. Изучение основных законов квантовой механики и необходимого математического аппарата.
2. Формирование навыков проведения расчетов квантовых задач, сравнение с результатами эксперимента.
3. 3.Изучение основных методологических подходов и приемов для решения физических задач в смежных областях.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП ВПО:

Стандарт по предмету

Квантовая теория.

Дуализм явлений микромира, дискретные свойства волн, волновые свойства частиц. Принцип неопределенностей. Принцип суперпозиции Наблюдаемые и состояния. Чистые и смешанные состояния. Эволюция состояний и физических величин. Соотношения между классической и квантовой механикой. Теория представлений. Общие свойства одномерного движения гармонического осциллятора. Туннельный эффект. Квазиклассическое движение. Теория возмущений. Теория момента. Движение в центрально-симметричном поле. Спин. Принцип тождественности одинаковых частиц. Релятивистская квантовая механика. Атом. Периодическая система элементов Менделеева. Химическая связь, молекулы. Квантование электромагнитного поля. Общая теория переходов. Вторичное квантование, системы с неопределенным числом частиц. Теория рассеяния.

Дисциплина «Квантовая теория» входит в федеральный компонент цикла «Общие профессиональные дисциплины» ОПД.Ф.1.5. Теория атомов, молекул, твердых тел изучается на основе знаний квантовой механики.

Для освоения дисциплины необходимо знать: основы дифференцирования, интегрирования, матричной алгебры, действия над векторами, включая понятия скалярного и векторного произведения, решения дифференциальных уравнений, элементы теории групп и дифференциальной геометрии. Кроме того, прослушать курс классической механики и электродинамики.

В результате освоения дисциплины обучающийся должен демонстрировать следующие результаты образования:

1. **Знать:** основные законы квантовой механики, основные разделы математического аппарата, определения физических величин , как имеющих классические аналоги , так и нет; основные фундаментальные явления в микромире и их анализ, что достигается посещением лекций и работой на практических занятиях и самостоятельно.

2. **Уметь:** правильно решать конкретные задачи в рамках математических моделей с использованием уравнений квантовой механики, эффективно применять полученные знания для изучения других специальных курсов физики. Использовать при работе справочную и учебную литературу; находить другие необходимые источники информации и работать с ними.

3.**Владеть**: основами теоретических знаний для решения практических задач в области физики на междисциплинарных границах физики с другими областями знаний; соответствующим математическим аппаратом для освоения основных положений теории и решения практических задач.

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ «Квантовая теория»

Общая трудоемкость дисциплины составляет 260 часов.

№ п/п	Раздел дисциплины	Виды учебной работы				Формы текущего контроля
		Лекции (час.)	Практические занятия (час.)	Лабораторные раб. (час.)	СРС (час.)	
1	**Основы квантовой механики** ***1.Волны де Бройля. Основные постулаты.*** ***2. Принцип суперпозиции состояний.*** ***3.Соотношение неопределенностей.*** ***4.Вероятность местоположения и импульса частицы.*** ***5.Статистические ансамбли квантовой механики.***	2			4	Домашнее задание (самостоятельное решение задач)
2	**Математический аппарат** ***1.Линейные самосопряженные операторы.*** ***2.Собственные значения и собственные функции операторов.*** ***3.Основные свойства собственных функций.***	4	6		8	Домашнее задание (самостоятельное решение задач) Тест (1-2

	4. Среднее значение величин. ***5.Вычисление вероятностей.*** ***6.Операторы координаты, импульса, момента импульса.*** **7.Оператор энергии и функции Гамильтона.**					разделы)
3	**ВО ВРЕМЕНИ ИЗМЕНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ** ***1.Уравнение Шредингера.*** ***2.Сохранение числа частиц.*** ***3.Стационарные состояния.*** ***4.Производные операторов по времени.*** ***5Уравнения движения .***	4	6		8	Контрольная работа (1-3 разделы) Домашнее задание (самостоятельное решение задач) Тест
4	**ОСНОВЫ ТЕОРИИ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ** ***1.Различные представления состояния квантовых систем.*** ***2.Различные представления операторов.*** ***3.Матрицы. Операторы в матричной форме.*** ***4.Уравнение Шредингера в матричной форме.*** ***5.Унитарные преобразования.***	4	4		8	Домашнее задание (самостоятельное решение задач) Тест
5	**МИКРОЧАСТИЦЫ В ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ПОЛЯХ** ***1.Гармонический осциллятор.*** ***2.Движение в поле центральной силы.*** ***3.Движение в кулоновском поле.*** ***4.Спектр и волновые функции атома водорода.*** ***5.Квантовые уровни двухатомной молекулы.*** ***6.Движение электрона в периодическом поле.*** ***7.Движение частицы в электромагнитном поле.***	4	6		8	Домашнее задание (самостоятельное решение задач) Тест
6	**СПИН ЭЛЕКТРОНА** ***1. Оператор спина.*** ***2. Спиновые функции.*** ***3. Уравнение Паули.*** ***4.Расщепление спектральных линий в магнитном поле.*** ***5.Свойства полного момента.*** ***6.Мультиплетная структура спектров.***	2	4		4	Домашнее задание (самостоятельное решение задач) Коллоквиум (1-6 разделы)

						Тест
7	**Теория возмущений** ***1.Возмущение в отсутствии вырождения.*** ***2.Возмущение при наличии вырождения.*** ***3.Расщепление уровней в случае двукратного вырождения.*** ***4.Симметрия и снятие вырождения.***	4	4		8	Домашнее задание (самостоятельное решение задач)
8	**ПРИМЕНЕНИЕ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ** ***1. Ангармонический осциллятор.*** ***2. Расщепление уровней в электрическом поле.*** ***3.Расщепление уровней атома водорода в электрическом поле*** ***4.Расщепление уровней в слабом магнитном поле.***	2	2		4	Контрольная работа (6-8 разделы) Домашнее задание (самостоятельное решение задач)
9	**Многочастичные системы** ***1.Законы сохранения полного импульса и момента импульса системы частиц.*** ***2. Связь законов сохранения с симметрией пространства и времени.*** ***3.Принцип тождественности микрочастиц*** ***4.Часицы Бозе и частицы Ферми. Принцип Паули.*** ***5.Приближенная количественная теория атома гелия.*** ***6.Квантовая механика атома и периодическая система элементов Менделеева.*** ***7.Вторичное квантование многочастичной системы.*** ***8.Применение функций Грина.***	4	4		8	Домашнее задание (самостоятельное решение задач)
10	**Уравнение Дирака** ***1.Уравнение Клейна-Гордона.*** ***2.Вывод уравнения Дирака.*** ***3.Матрицы Дирака и ковариантный вид уравнения.*** ***4.Решение уравнения Дирака для свободной частицы.*** ***5.УравнениеДирака во внешнем поле.*** ***6.Уравнение Дирака для атома водорода.*** ***7.Нерелятивистский предельный случай.***	5			10	Домашнее задание (самостоятельное решение задач) Тест (9-10 разделы)
11	**Квантование полей** ***1.Постановка задачи.***	1			2	Домашнее задание

	2.Квантование электромагнитного поля.					(самостоятельное решение задач)
	ЭКЗАМЕН				27	
	ИТОГО ЗА 7 СЕМЕСТР	36	18		57	
	ИТОГО	72	54		134	

5 . СОДЕРЖАНИЕ РАЗДЕЛОВ И ТЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

1. Волны де Бройля. Основные Постулаты.

Идея де Бройля о волновых свойствах частиц. Статистическое толкование волн де Бройля. Вероятность обнаружения частицы в данном месте пространства в данный момент времени. Волновая функция. Смысл квадрата модуля волновой функции. Связь энергии с частотой и импульса с волновым вектором.

2. Принцип суперпозиции состояний.

Возможность нахождения частицы в различных состояниях. Описание состояния как суперпозиции волн де Бройля, т.е. состояний с заданным импульсом частицы. Линейность принципа суперпозиции: волновые функции складываются.

3. Соотношение неопределенностей.

Соотношение неопределенностей важнейшее фундаментальное свойство квантовых ансамблей. Невозможность применения понятия траектории к движению микрочастиц. Чем точнее определено местоположение частицы, тем менее определено значение импульса. Невозможность точной локализации частицы.

4.Вероятность местоположения и импульса частицы.

Принцип суперпозиции позволяет определить не только вероятность значений координаты, но и вероятность тех или иных значений импульса. Это есть основа для определения средних значений функций от координат и импульсов.

5.Статистические ансамбли квантовой механики.

Чистый ансамбль. Смешанный ансамбль. Интерференция между состояниями в чистом ансамбле. Отсутствие интерференции в смешанном ансамбле.

МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ

1.Линейные самосопряженные операторы.

Сопоставление физическим величинам операторов. Класс линейных самосопряженных операторов (эрмитовские операторы). Определение линейности, суммы, произведения операторов. Коммутатор операторов. Самосопряженность оператора. Определение среднего значения величины через волновую функцию и эрмитов оператор.

2.Собственные значения и собственные функции операторов.

Определение собственных значений и собственных функций операторов и их физический смысл. Уравнение на собственные значения. Дискретные (квантованные) значения физических величин как спектр самосопряженного оператора. Различные виды спектров. Вещественность собственных значений.

3.Основные свойства собственных функций.

Конечность, непрерывность, однозначность волновых функций. Теорема об ортогональности собственных функций. Нормировка собственных функций. Система вырожденных собственных функций. Нормировка на функцию Дирака собственных функций непрерывного спектра.

4. Среднее значение величин.
Формула для среднего значения величины. Среднее квадратичное отклонение. Постулат о соответствии среднего значения величины среднему значению оператора. Вещественность средних значений величин.

5.Вычисление вероятностей.
Представление волновой функции в виде ряда собственных функций. Квадрат модуля амплитуды собственного состояния. Определение среднего значения в виде ряда по собственным значениям. Вероятность выпадения того, или иного значения. Вычисление вероятностей для непрерывного спектра.

6.Операторы координаты, импульса, момента импульса.
Фундаментальные перестановочные соотношения Гейзенберга для координаты и импульса. Соотношения общего вида для функций координат и операторов импульса. Дифференциальный вид оператора импульса в представлении Шредингера. Собственные функции и собственные значения операторов координаты и импульса. Определение оператора момента импульса и квадрата момента. Коммутационные соотношения между компонентами момента импульса. Собственные значения и собственные функции оператора момента импульса. Орбитальное квантовое число. Магнитное квантовое число. Сферические функции. Полиномы Лежандра.

7.Оператор энергии и функции Гамильтона.
Оператор кинетической энергии. Оператор Лапласа. Собственные функции оператора кинетической энергии в виде плоских волн де Бройля. Вид оператора в сферической системе координат. Оператор полной энергии. Оператор Гамильтона.

ИЗМЕНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ВО ВРЕМЕНИ

1.Уравнение Шредингера.
Основное уравнение квантовой механики в нерелятивистском пределе. Уравнение Шредингера как линейное уравнение первого порядка. Периодические решения уравнения Шредингера. Изменение волновой функции во времени полностью определяется заданной волновой функцией в начальный момент времени и оператором Гамильтона. Полный набор механических переменных. Одновременная измеримость. Число степеней свободы.

2.Сохранение числа частиц.
Уравнение непрерывности. Плотность вероятности. Плотность тока вероятности. Закон сохранения числа частиц. Плотность тока при наличии магнитного поля.

3.Стационарные состояния.
Состояния с определенным значением энергии. Уравнение Шредингера для стационарных состояний. Вероятность нахождения значения механической величины не зависит от времени.

4.Производные операторов по времени.
Производная от оператора. Квантовая скобка Пуассона. Производная от среднего значения.

5Уравнения движения.
Квантовые уравнения Гамильтона. Связь между скоростью и импульсом. Законы изменения импульса во времени. Теоремы Эренфеста.

ОСНОВЫ ТЕОРИИ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

1.Различные представления состояния квантовых систем.

X-представление (координатное). P-представление (импульсное). E-представление (энергетическое).

2.Различные представления операторов.

Выбор базиса представления. Формулы перехода от одного базиса к другому. Вид оператора.

3.Матрицы. Операторы в матричной форме.

Представление оператора в виде матрицы. Элементы матрицы оператора в различных представлениях. Диогональная матрица. Комплексно сопряженная. Транспонированная матрица. Эрмитовская (самосопряженная) матрица. Задание состояния в виде столбца или строки. Нумерация матричных элементов в случае непрерывного спектра.

4. Уравнение Шредингера в матричной форме.

Оператор в матричной форме. Определение среднего значения. Спектр величины. Вывод уравнения Шредингера в матричной форме. Зависимость оператора от времени в матричной форме. Матричные элементы квантовых скобок Пуассона.

5. Унитарные преобразования.

Матрицы преобразований от одного представления к другому. Связь между матрицами в различных базисах. Определение матрицы унитарного преобразования. Свойства унитарных преобразований. Унитарные преобразования от одного момента времени к другому. Матрица рассеяния. Гейзенберговское представление. Представление взаимодействия.

МИКРОЧАСТИЦЫ В ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ПОЛЯХ

1.Гармонический осциллятор.

Гамильтониан гармонического осциллятора. Уравнение Шредингера в координатном представлении. Решения уравнения. Полиномы Чебышева-Эрмита. Стационарные состояния осциллятора. Энергия осциллятора. Главное квантовое число. Узлы волновых функций осциллятора. Нулевая энергия осциллятора. Осциллятор в энергетическом представлении.

2.Движение в поле центральной силы.

Сферическая симметрия задачи. Вид оператора Гамильтона в сферических координатах. Уравнение Шредингера для стационарных состояний. Определение числа независимых величин. Квадрат момента импульса. Z-проекция момента импульса. Собственные волновые функции. Асимптотическое поведение потенциальной энергии. Вид радиальных волновых функций. Сходящиеся и расходящиеся сферические волны. Энергетический спектр для $E>0$ (непрерывный). Энергетический спектр для $E<0$ (дискретный спектр). Полюсные особенности потенциальной энергии.

3.Движение в кулоновском поле.

Кулоновская потенциальная энергия. Водородоподобные атомы. Уравнение Шредингера для радиальной волновой функции. Асимптотическое поведение решений. Набор квантовых чисел. Полиномы Лагерра. Энергетические уровни. Вырождение.

4.Спектр и волновые функции атома водорода.

Спектральные термы атома водорода. Постоянная Ридберга-Ритца. Частоты переходов. Спектральные серии. Серии Бальмера и Лаймана. Волновые функции для s,p,d-состояний. Распределение заряда. Боровский радиус. Классификация термов по квантовым числам. Вычисление вероятностей.

5.Квантовые уровни двухатомной молекулы.

Вид потенциальной энергии взаимодействия двух атомов. Разделение движений. Движение с приведенной массой. Оператор Гамильтона для относительного движения атомов. Решение для радиальной функции. Энергии уровней двухатомной молекулы. Колебательные и вращательные моды.

6.Движение электрона в периодическом поле.

Периодическое потенциальное поле. Условие периодичности. Уравнение Шредингера с периодическим потенциалом в одномерном случае. Зонный (полосатый) спектр энергии. Разрешенные и запрещенные энергетические зоны. Модулированная плоская волна. Эффективная масса заряженной частицы в центре и на краю зоны.

7.Движение частицы в электромагнитном поле.

Гамильтониан заряженной частицы в произвольном электромагнитном поле. Обобщенный импульс. Уравнения движения для оператора координаты и оператора импульса. Однородное магнитное поле. Уровни энергии и собственные волновые функции.

СПИН ЭЛЕКТРОНА

1. Оператор спина.

Собственный магнитный и механический момент (спин). Отображение спина самосопряженным оператором. Два значения проекции на любое направление. Отображение спина двухрядными матрицами. Матрицы Паули. Собственные значения проекции и квадрата момента спина. Коммутационные соотношения между компонентами оператора спина.

2. Спиновые функции.

Собственные волновые функции оператора спина (спиновые функции). Нормировка и ортогональность спиновых функций. Двухкомпонентные спиновые функции. Среднее значение спиновой величины.

3. Уравнение Паули.

Взаимодействие собственного магнитного момента электрона с внешним магнитным полем. Гамильтониан с учетом спина. Уравнение Паули. Плотность вероятности и плотность тока вероятности. Средняя плотность магнитного момента.

4.Расщепление спектральных линий в магнитном поле.

Уравнение Паули с учетом внешнего магнитного поля. Стационарные состояния. Расщепление S-уровня и P-уровня. Простой эффект Зеемана. Прецессионное движение момента импульса.

5.Свойства полного момента.

Оператор полного момента. Соотношения коммутации компонент полного момента импульса. Оператор квадрата полного момента импульса. Собственные значения и собственные волновые функции квадрата полного момента. Уравнение на собственные значения z-компоненты полного момента. Сложение двух моментов.

6.Мультиплетная структура спектров.

Четыре квантовых числа, определяющих состояние электрона: главное, орбитальное, полного момента и проекции на ось Z. Нумерация уровней в атоме.
Электронные оболочки в атоме.

ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

1.Возмущение в отсутствии вырождения.

Добавочная энергия в гамильтониане как возмущение. Решение уравнения Шредингера с учетом выбранного представления. Матричный вид уравнения. Разложение энергии и волновых функций в ряд по малому параметру (малому возмущению). Одному уровню энергии соответствует одна волновая функция. Методика вычисления поправок к энергии и волновым функциям. Матричный элемент оператора возмущения.

2.Возмущение при наличии вырождения.

Вырождение уровня. Волновые функции принадлежащие одному уровню. Модификация матричного уравнения с учетом вырождения. Первый этап: получение первых поправок по энергии и нулевого приближения волновых функций. Второй этап: получение поправок n-го порядка.

3.Расщепление уровней в случае двукратного вырождения.

Общий случай двухкратного вырождения. Ортогональное преобразование в двумерном векторном пространстве от одного базиса к другому. Расщепление уровня энергии на два уровня. Вычисление нулевого приближения волновых функций для каждого расщепленного уровня.

4.Симметрия и снятие вырождения.

Вырождение как следствие симметрии. Инвариантность гамильтониана относительно преобразований симметрии. Нарушение симметрии. Частичное или полное снятие вырождения. Пример трехмерного гармонического осциллятора. Группа симметрии. Представление группы. Группа трехмерных вращений.

ПРИМЕНЕНИЕ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

1. Ангармонический осциллятор.

Выражение для потенциальной энергии с добавочным возмущающим членом. Решение в одномерном случае. Вычисление матричных элементов оператора возмущения. Нахождение поправок к уровням энергии с учетом ангармонизмов. Условие применимости приближения.

2. Расщепление уровней в электрическом поле.

Оценка величины электрического поля как возмущающего поля. Учет возмущения в уравнении Шредингера (взаимодействие электрического момента с электрическим полем). В водородоподобном атоме поправки по энергии квадратичны по полю, с учетом деформации атома линейны по полю. Снятие вырождения. Нарушение сферической симметрии.

3.Расщепление уровней атома водорода в электрическом поле.

Второй квантовый уровень (четырехкратное вырождение). Явные выражения для радиальных и угловых частей волновых функций используются для получения первых поправок по энергии и нулевого приближения для волновых функций. Для заданного выражения возмущения строится матрица матричных элементов и решается уравнение Шредингера. Вырождение частично снимается: вырожденный уровень расщепляется на три уровня. Вновь вычисленные волновые функции диагонализируют матрицу возмущений и показывают, в каких состояниях матричные элементы электрического момента равны нулю.

4.Расщепление уровней в слабом магнитном поле.

В качестве возмущения используется слабое магнитное поле. Строится уравнение Шредингера. Дополнительные члены в гамильтониане отражают взаимодействие спина с орбитальным движением и магнитным полем. Полученное расщепление уровней гораздо сложнее. Само явление носит название аномального эффекта Зеемана. Расщепление уровней s,p,d в слабом магнитном поле.

МНОГОЧАСТИЧНЫЕ СИСТЕМЫ

1.Законы сохранения полного импульса и момента импульса системы частиц.

В нерелятивистском пределе в пространстве конфигураций системы определяется волновая функция системы, которая определяет эволюцию во времени и подчиняется уравнению Шредингера. Уравнение непрерывности, вероятность конфигурации, поток вероятности. Оператор полного импульса системы. Среднее значение полного импульса сохраняется во времени в отсутствии внешних сил. Движение центра тяжести системы. Относительные движения частиц системы. Гамильтониан для движения центра тяжести и для относительного движения. Разделение переменных. Два уравнения описывающих эти движения. Оператор момента импульса системы. Закон сохранения момента импульса.

2. Связь законов сохранения с симметрией пространства и времени.

Закон сохранения энергии и однородность времени. Закон сохранения импульса и трансляционная инвариантность. Закон сохранения момента импульса и изотропность пространства (инвариантность относительно вращений). Закон сохранения четности и инверсия пространства.

3.Принцип тождественности микрочастиц.

Совокупность частиц тождественных между собой (величины, характеризующие частицы, одинаковы). Гамильтониан системы. Особенность гамильтониана: масса частиц, энергия во внешнем поле и энергия взаимодействия для всех частиц одинаковы. Инвариантность гамильтониана системы тождественных частиц относительно перестановки координат любой пары частиц. Два класса состояний: симметричные и антисимметричные состояния.

4.Часицы Бозе и частицы Ферми. Принцип Паули.

Принадлежность к классу состояний определяется природой частиц. Частицы Бозе имеют целочисленный спин и описываются симметричными волновыми функциями. Ансамбль

Бозе-Эйштейна. Частицы Ферми имеют полуцелый спин и описываются антисимметричными волновыми функциями. Ансамбль Ферми-Дирака. Принцип Паули: в одном и том же состоянии не может находиться более одной частицы с полуцелым спином

5.Приближенная количественная теория атома гелия.

Две группы взаимодействий: кулоновские взаимодействия между ядром и электронами и слабые магнитные взаимодействия обусловленные спином электронов. Гамильтониан атома гелия. Два класса функций описывающих атом гелия: симметричные и антисимметричные. Решения уравнения Шредингера (с использованием теории возмущений) дают уровни энергии и волновые функции состояний. Ортогелий. Парагелий. Обменная энергия.

6.Квантовая механика атома и периодическая система элементов Менделеева.

Строение атома. Периодичность в структуре электронных оболочек атомов. Порядковый номер элемента в периодической системе. Полные и незаполненные электронные оболочки. Квантовые числа, характеризующие электроны в оболочках. K, L, M, N оболочки атомов. Периодичность как повторимость в структуре внешних электронных оболочек.

7.Вторичное квантование многочастичной системы.

Метод вторичного квантования. Числа заполнения состояний. Операторы рождения и уничтожения. Коммутационные соотношения для операторов рождения и уничтожения для Бозе и Ферми частиц. Запись гамильтониана через операторы рождения и уничтожения. Построение N-частичных состояний. Уравнение Шредингера для таких состояний.

8.Применение функций Грина.

Определение функции Грина. Уравнение на функцию Грина. Итерационное решение уравнения Шредингера с использованием функций Грина. Борновское приближение. Рассеяние частицы.

Уравнение Дирака

1.Уравнение Клейна-Гордона.

Релятивистское соотношение между массой, импульсом и энергией. Уравнение Клейна-Гордона. Уравнение непрерывности. Решения для свободной частицы. Проблемы с интерпретацией плотности вероятности.

2.Вывод уравнения Дирака.

Уравнение линейное по первым производным. Многокомпонентная волновая функция. Уравнение непрерывности. Определение плотности вероятности и плотности тока вероятности. Матричный вид гамильтониана Дирака.

3.Матрицы Дирака и ковариантный вид уравнения.

Матрицы Дирака. Соотношения коммутации для матриц Дирака. Четверка - как минимальная размерность матриц Дирака. Свойства матриц. Уравнение Дирака в 4-х мерном пространстве Минковского. Переход к гамма матрицам Дирака. Ковариантная запись уравнения Дирака. Свойства и явный вид γ матриц. Релятивистская инвариантность уравнения Дирака.

4.Решение уравнения Дирака для свободной частицы.

Решение уравнения для свободной частицы в виде плоских волн с четырехкомпонентным столбцом. Нахождение компонент для положительной и отрицательной энергии. Нормировка решений. Спин. Собственные значения оператора спина. Оператор полного момента.

5.Уравнение Дирака во внешнем поле.

Обобщенный импульс. Уравнение Дирака с учетом внешнего электромагнитного поля. Ковариантная запись через тензор электромагнитного поля.

6.Уравнение Дирака для атома водорода.

Решение уравнения для кулоновского потенциала. Сферическая симметрия. Угловая и радиальная части волновой функции. Уровни энергии. Решения с отрицательной энергией. Позитрон.

7.Нерелятивистский предельный случай.

Малые и большие компоненты решений уравнения Дирака. Приближение для малых скоростей. Получение двух уравнений для двух связанных двухкомпонентных спиноров. Вывод уравнения для одного двухкомпонентного спинора с учетом спин-орбитального взаимодействия. Сравнение с уравнением Шредингера.

КВАНТОВАНИЕ ПОЛЕЙ

1.Постановка задачи.

Аналитическая механика полей: лагранжев и гамильтонов формализмы. Вариационный принцип. Уравнения поля. Сопряженные переменные, обобщенный импульс. Переход к операторам поля и обобщенного импульса. Коммутационные соотношения. Операторы рождения и уничтожения. Многочастичное представление для шредингеровского поля. Оператор полной энергии и числа частиц. Задание состояний поля.

2.Квантование электромагнитного поля.

Разложение векторного потенциала по ортонормированной системе плоских волн. Вектора поляризации. Операторы рождения и уничтожения фотонов. Переход к совокупности квантовых осцилляторов. Энергия стационарных состояний поля. Выражение для напряженности **E** и индукции **B** через операторы рождения и уничтожения фотонов. Рассеяние фотонов на электронах (эффект Комптона).

ПРАКТИЧЕСКИЕ ЗАНЯТИЯ (36час.)

№ темы	Тема занятия	№№ задач по [16], Б-[17]	Задания на дом, по [16], Б-[17]	Число часов
1	**МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ** ***1.Линейные самосопряженные операторы.*** ***2.Собственные значения и собственные функции операторов.*** ***3.Основные свойства собственных функций.*** ***4. Среднее значение величин.*** ***5.Вычисление вероятностей.*** ***6.Операторы координаты, импульса, момента импульса.*** ***7.Оператор энергии и функции Гамильтона.***	9-12, 15,18 ,20 , 22, 23, 24, 25, 27, 29, 30, 33, 34, 37, 38, 41 Б-1.3, Б-1.8, Б-1.18	13, 14, 16, 17, 19, 21, 26, 28, 31, 32 Б-1.4, Б-1.9, Б-1.19	6

2	**Изменение состояния во времени** ***1.Уравнение Шредингера.*** ***2.Сохранение числа частиц.*** ***3.Стационарные состояния.*** ***4.Производные операторов по времени.*** ***5.Уравнения движения.***	43, 44, 47, 49, 51 Б-2.1, Б-2.4, Б-2.5, Б-2.14	46, 48, 50 Б-2.8, Б-2.15	6
3	**Основы теории представлений** ***1.Различные представления состояния квантовых систем.*** ***2.Различные представления операторов.*** ***3.Матрицы. Операторы в матричной форме.*** ***4.Уравнение Шредингера в матричной форме.*** ***5.Унитарные преобразования.***	77, 78, 80, 83, 86, 87 Б-1.36, Б-1.39, Б-1.41	79, 84, 85, 88 Б-1,37, Б-1.40, Б-1.42	4
	Контрольная работа 1	**темы 1-3**		**2**
4	**Микрочастицы в потенциальных полях** ***1.Гармонический осциллятор.*** ***2.Движение в поле центральной силы.*** ***3.Движение в кулоновском поле.*** ***4.Спектр и волновые функции атома водорода.*** ***5.Квантовые уровни двухатомной молекулы.*** ***6.Движение электрона в периодическом поле.*** ***7.Движение частицы в электромагнитном поле.***	52, 53, 58, 63, 65, 68, 70, 71, 74, 76 Б-4.4, Б-4.8	54, 55, 59, 62, 67, 69, 72, 73 Б-4.6, Б-4.9	6

5	**СПИН ЭЛЕКТРОНА** ***1. Оператор спина.*** ***2. Спиновые функции.*** ***3. Уравнение Паули.*** ***4.Расщепление спектральных линий в магнитном поле.*** ***5.Свойства полного момента.*** ***6.Мультиплетная структура спектров.***	102, 104, 106, 107 Б-5.1, Б-5.3, Б-5.6	103, 105, 108 Б-5.2, Б-5.4, Б-5.7	4
6	**ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ** ***1.Возмущение в отсутствии вырождения.*** ***2.Возмущение при наличии вырождения.*** ***3.Расщепление уровней в случае двукратного вырождения.*** ***4.Симметрия и снятие вырождения.***	109, 111 Б-8.1	110, 112 Б-8.2	2
	Контрольная работа 2	**темы 4-6**		**2**
7	**ПРИМЕНЕНИЕ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ** ***1. Ангармонический осциллятор.*** ***2. Расщепление уровней в электрическом поле.*** ***3.Расщепление уровней атома водорода в электрическом поле*** ***4.Расщепление уровней в слабом магнитном поле.***	113, 114, 116, 117 Б-8.6, Б-8.10, Б-8.12	115, 118 Б-8.11, б-8.13	4
8	**МНОГОЧАСТИЧНЫЕ СИСТЕМЫ** ***3.Принцип тождественности микрочастиц*** ***4.Часицы Бозе и частицы Ферми. Принцип Паули.*** ***5.Приближенная количественная теория атома гелия.*** ***7.Вторичное квантование многочастичной системы.*** ***8.Применение функций Грина.***	Б-10.1, Б-10.2, Б-10.13, Б-10.14	Б-10.3, Б-10.4, Б-10.19	2

9	**Уравнение Дирака** ***1.Уравнение Клейна-Гордона.*** ***2.Вывод уравнения Дирака.*** ***3.Матрицы Дирака и ковариантный вид уравнения.*** ***4.Решение уравнения Дирака для свободной частицы.*** ***5.УравнениеДирака во внешнем поле.*** ***6.Уравнение Дирака для атома водорода.*** ***7.Нерелятивистский предельный случай.***	Б-15.8, Б-15.20, Б-15-24	Б-15.9, Б-15.22, Б-15.26	2
	Зачетное занятие			2
	Итого			36

Правила выполнения домашних заданий.

1. Домашние задания выполняются студентами в тетрадях по практическим занятиям и оформляются на листах А 4 с соответствующим титульным листом.
2. Каждая задача оформляется на отдельном листе. Задача должна иметь условие (полное и краткое), решение должно иметь краткое обоснование, чертеж. Чертежи допускается аккуратно выполнять от руки. Формулы должны быть записаны четко и предельно аккуратно, следует четко выделять индексы, векторные величины.
   Срок сдачи - не позже 2х недель после завершения изучения темы.

6. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА СТУДЕНТОВ

1. Изучение теоретического материала, подготовка к практическим занятиям и семинарам:
   Темы - в соответствии с таблицей практических занятий.
   Содержание - в соответствии с программой и контрольными вопросами.
2. Выполнение домашних заданий - в соответствии с таблицей.
3. Контрольные работы №1: темы 1-3, 8 неделя
   №2: темы 4-6. 13 неделя
4. Подготовка к контрольным работам - в основном состоит в выполнении домашних задач и краткого повторения. Темы - в соответствии с таблицей практических занятий.
5. Подготовка к экзамену. Для контроля понимания следует внимательно изучить контрольные вопросы.

8.ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Лекции могут проводиться с использованием интерактивной доски и мультимедийного оборудовании.

Практические занятия по решению задач проводятся с выделением логически важных подходов к решению каждой конкретной задачи; преподаватель предлагает студентам изобразить решаемую ситуацию схематически; обсуждения методов и подходов к решению задачи; обсуждения полученных результатов.

При изучении дисциплины «Квантовая теория» применяются следующие интерактивные технологии: метод заданий, метод дебатов, метод презентации информации.

9. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ И УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ

КАЧЕСТВЕННЫЕ ВОПРОСЫ

ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

1. Каковы соотношения де Бройля? Что такое волна де Бройля? Как определяется групповая и фазовая скорость? Как строится волновой пакет?
2. Что такое интенсивность волн де Бройля? Чему пропорциональна? Запишите вероятность местонахождения частицы и плотность вероятности через волновую функцию. Дайте определение нормировки волновой функции.
3. Сформулируйте принцип суперпозиции. Запишите волновое поле ψ в виде суперпозиции волн де Бройля.
4. Дайте определение плотности вероятности импульса микрочастицы. Приведите формулы средних значений функций от координат и функций от импульсов.
5. Постройте волновой пакет. Приведите соотношение меду размером волнового пакета и изменением волнового вектора. Напишите приближенное соотношение неопределенностей. Дайте строгий вывод соотношения между средними квадратичными отклонениями (соотношения неопределенностей). Какова физическая трактовка?
6. Что такое квантовый ансамбль частиц? Определите чистый и смешанный ансамбли.
7. Какова роль измерительного прибора? Измерение в квантовой механике.

МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ

8. Дайте определение линейного оператора и линейного самосопряженного оператора. Какие свойства имеют операторы? Как определяется среднее значение функций от координат и импульсов? Что такое алгебра некоммутативных величин?
9. Какова основная идея применения операторов в квантовой механике? Сформулируйте постулат о соответствии между величинами и операторами. Запишите выражение для среднего значения величины через оператор и волновую функцию. Запишите среднее квадратичное отклонение оператора.
10. Напишите формулу для среднего значения и среднего квадратичного отклонения в состояниях, где величина имеет точное значение. Напишите уравнение для собственных значений и собственных функций. Определите собственные значения и собственные функции оператора.
11. Приведите свойства волновых функций.

12. Дайте формулировку постулата о соответствии собственных значений и результатов измерений физической величины. Дайте характеристики спектров операторов. Какие величины изображают самосопряженные операторы?

13. Сформулируйте теорему об ортогональности собственных волновых функций. Напишите формулу о разложении в ряд по собственным функциям.

14. Чему равна вероятность найти значение механической величины? Сформулируйте условия возможности одновременного измерения разных механических величин.

15. Определите наборы динамических переменных. Выпишите перестановочные соотношения Гейзенберга. В чем фундаментальный смысл этих соотношений? Какой вид оператора импульса в координатном представлении?

16. Напишите в явном виде оператор момента импульса. Коммутируют ли проекции момента импульса между собой? Выпишите соотношения коммутации для проекций момента. Какой оператор коммутирует со всеми проекциями момента?

17. Выпишите в явном виде проекции оператора момента импульса в сферической системе координат. Напишите уравнение на собственные значения для квадрата момента импульса. Чему равны эти значения? В каких функциях записываются решения этого уравнения?

18. Каков вид оператора кинетической энергии? Напишите уравнение на собственные значения в декартовой и сферической системе координат. Какие решения имеет это уравнение? Чему равен оператор полной энергии?

19. Каковы правила написания оператора функции Гамильтона? В каких случаях он совпадает с полной энергией?

ИЗМЕНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ВО ВРЕМЕНИ

20. Как связаны между собой волновые функции в различные моменты времени? Определяет ли полностью волновая функция динамическое состояние системы? Каков вид оператора смещения во времени?

21. В каком виде постулируется оператор смещения во времени? Каким уравнением определяется развитие волновой функции во времени? Выпишите уравнение Шредингера и дайте характеристику этого уравнения.

22. Определение полного набора переменных. Коммутируют ли операторы из полного набора? Имеют ли они одинаковые собственные функции?

23. Выпишите уравнение непрерывности. Какие величины оно связывает? Как нужно трактовать это уравнение?

24. Если гамильтониан не зависит от времени, можно ли разделить переменные в уравнении Шредингера? Напишите уравнение на собственные значения гамильтониана (стационарное уравнение Шредингера). Какова структура волновых функций?

25. Как определяется производная по времени оператора? Выпишите квантовую скобку Пуассона. Свойства скобок Пуассона.

26. Уравнения движения для оператора координат и оператора импульса. Выпишите квантовые уравнения Гамильтона. Теоремы Эренфеста. Сформулируйте квантовое уравнение Ньютона для средних. В каких случаях полная энергия является интегралом движения?

ОСНОВЫ ТЕОРИИ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

27. Какие представления есть? Выпишите волновые функции в различных представлениях. Как выглядит переход от «E» - представления к «x» - представлению?

28. Сформулируйте идею записи оператора, в каком либо представлении. Матричное представление оператора. Какой матрицей изображается самосопряженный оператор? Действия над матрицами. Вид операторов координаты и импульса в различных представлениях.

29. Определите среднее значение величины через матрицу оператора. Какой матрицей изображается величина в своем собственном представлении?

30. Получите уравнение Шредингера в матричном виде. Определите производную оператора в матричном виде через матричные элементы скобки Пуассона.

31. Определение унитарного преобразования. Выпишите формулу перехода от одного представления к другому через унитарную матрицу. Свойства унитарных матриц.

32. Определение матрицы рассеяния. Что определяют матричные элементы матрицы рассеяния? Вероятности квантовых переходов.

33. Дайте краткие характеристики представлениям Шредингера, Гейзенберга, взаимодействия.

МИКРОЧАСТИЦЫ В ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ПОЛЯХ

34. Выпишите оператор Гамильтона и уравнение Шредингера для гармонического осциллятора. Дайте характеристику уравнению.

35. Каковы собственные значения (уровни энергии) и собственные функции гармонического осциллятора? Сколько узлов имеет волновая функция?

36. Что такое нулевая энергия? Сравните с классическим случаем.

37. Запишите в энергетическом представлении матрицу гамильтониана, координаты и импульса.

38. Какой вид имеет гамильтониан частицы с учетом сферической симметрии? Можно ли разделить переменные в уравнении Шредингера? Какова структура волновой функции?

39. Операторы каких величин коммутируют с гамильтонианом?

40. Запишите уравнение Шредингера для радиальной волновой функции. Каким асимптотическим поведением должна обладать потенциальная энергия? Какой спектр энергии микрочастицы при $E>0$ и $E<0$? Полюсные особенности потенциальной энергии.

41. Приведите асимптотические решения на бесконечности и в нуле для радиальной функции. Существуют ли периодические и апериодические решения? В каком виде выбираются решения? Какие условия накладываются на коэффициенты для различных спектров?

42. Приведите графики для потенциальной энергии в случае: отталкивания, притяжения, комбинированный.

43. Уравнение для радиальной функции в кулоновском поле. Получите уравнение для безразмерных величин. В каком виде выбираются решения, чтобы волновые функции были конечны и однозначны? При каких энергиях существуют такие решения?

44. Приведите набор квантовых чисел. Существует ли вырождение по энергии в кулоновском поле?

45. Выпишите уровни энергии атома водорода. Определите спектральные термы. На основе формулы переходов между уровнями приведите примеры спектральных серий.

46. Выпишите волновые функции для первых двух уровней атома водорода. Определите первый боровский радиус. Проанализируйте распределение заряда в первых состояниях атома водорода.

47. Как разделяется движение в молекуле из двух атомов? Сведите задачу к движению в поле центральной симметрии. Чем отличается от атома водорода?

48. От каких квантовых чисел зависит энергия молекулы? Что больше энергия колебаний или энергия вращения молекулы?

49. Рассмотрите периодический потенциал, запишите условия периодичности. Перейдите к алгебраической системе уравнений в импульсном пространстве, сделав Фурье преобразование уравнения Шредингера. Дайте характеристику разрешенной и запрещенной зонам энергии. Отличается ли движение в центре и на краю зоны? Что такое эффективная масса?

50. Постройте гамильтониан движения заряженной частицы в электромагнитном поле, заменяя импульс на обобщенный.

51. Постройте основные коммутаторы при выводе уравнений движения в электромагнитном поле.

СПИН ЭЛЕКТРОНА

52. Какие эксперименты доказывают существование собственного магнитного момента электрона?

53. Определение оператора спина. Коммутационные соотношения между компонентами спина. Выпишите спиновые матрицы. Какие квантовые числа описывают спин? Выпишите матрицы Паули.

54. Сколько компонент имеет волновая функция? Запишите спинор Паули. Как определяется среднее по состоянию?

55. Перейдите от уравнения Шредингера к уравнению Паули. Какие добавочные члены имеет гамильтониан? Чем отличается уравнение непрерывности?

56. Напишите уравнение Паули в однородном магнитном поле с точностью до первого порядка по полю. Найдите стационарные состояния. Расщепляется ли S состояние?

57. Определите оператор полного момента. Коммутируют ли между собой компоненты оператора полного момента? Определите квадрат полного момента. Выпишите коммутаторы с орбитальным моментом и спином.

58. Дайте решение уравнения на собственные значения и собственные функции квадрата полного момента. Через какое квантовое число определяется полный момент?

59. Какое значение принимает проекция момента? Приведите квантовое число.

60. Приведите пример нумерации атомного терма через квантовые числа.

ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

61. Сформулируйте задачу использования малой возмущающей энергии. Выпишите систему алгебраических уравнений с использованием матричных элементов возмущения. Получите разложение энергии по параметру малости.

62. Какой вид имеют поправки первого и второго порядка малости к энергии, когда отсутствует вырождение уровня?

63. Для случая вырождения сформулируйте задачу получения нулевого приближения для волновой функции. На сколько уровней распадается вырожденный уровень при наложении возмущения?

64. Решите систему для двукратно вырожденного уровня. Покажите, как снимается вырождение. Нарушается ли симметрия физической системы?

ПРИМЕНЕНИЕ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

65. Запишите гамильтониан для ангармонического осциллятора. Что можно взять за возмущение? Каково условие применимости теории возмущений?

66. Используя энергию электрического момента как энергию возмущения, запишите уравнение Шредингера и обсудите для водородоподобного атома поправки к энергии.

67. Используйте электрическое поле как возмущение при рассмотрении второго уровня атома водорода. Вычислите матричные элементы оператора возмущения по невозмущенным волновым функциям и решите уравнения. Каковы новые уровни энергии? Полностью ли снято вырождение?

68. Сформулируйте задачу движения электрона со спином в слабом магнитном поле. Дополните гамильтониан членами спин-орбитального взаимодействия. Покажите, как расщепляются уровни S и P.

МНОГОЧАСТИЧНЫЕ СИСТЕМЫ

69. Сформулируйте принцип тождественности микрочастиц. Какова симметрия гамильтониана? К чему приводит перестановка двух частиц? Какие состояния следуют из принципа тождественности микрочастиц? Существуют ли переходы между этими состояниями?

70. Какими функциями описываются частицы Бозе и Ферми? Какие спины имеют эти частицы? Сформулируйте принцип Паули для ферми-частиц. Какими волновыми функциями описываются эти частицы?

71. Выпишите приближенный гамильтониан атома гелия. Как можно разделить переменные? В каких спиновых состояниях могут находиться электроны? Что такое ортогелий и парагелий? Какое вырождение называют обменным?

72. Как определяются операторы рождения и уничтожения? Выпишите гамильтониан через эти операторы. Как строятся N частичные состояния с помощью этих операторов? Что такое числа заполнения состояний?

УРАВНЕНИЕ ДИРАКА

73. Какие трудности существуют при физической интерпретации уравнения Клейна-Гордона?

74. Приведите основные этапы вывода уравнения Дирака. Что собой представляет волновая функция и гамильтониан?

75. Какова размерность и свойства матриц Дирака? Приведите явный вид матриц Дирака.

76. Что такое инвариантность уравнения Дирака? Запишите уравнение Дирака в ковариантной форме.

77. Выпишите решения уравнения Дирака для свободной частицы: для случая положительной и отрицательной энергии. Что такое большая и малая компоненты?

78. Сделайте замену операторов и запишите уравнение Дирака во внешнем электромагнитном поле.

79. Как осуществляется переход к малым скоростям? Обсудите кратко спин-орбитальное взаимодействие.

80. Для случая сферической симметрии и кулоновского потенциала запишите систему четырех алгебраических уравнений. Какая формула для уровней энергии следует из решения этих уравнений? В чем отличие от решения из уравнения Шредингера?

ВОПРОСЫ К ЗАЧЕТУ И ЭКЗАМЕНУ

1. Теория Бора. Трудности классической физики. Постоянная Планка. Энергия и импульс световых квантов.
2. Волны де Бройля. Групповая скорость.
3. Статистическое толкование волн де Бройля.
4. Вероятность нахождения микрочастицы.
5. Вероятность импульса микрочастицы.
6. Среднее значение величины.
7. Общий метод вычисления вероятностей результатов измерения.
8. Соотношение неопределенностей.
9. Условия возможности одновременного измерения разных механических величин.
10. Принцип суперпозиции состояний.
11. Определение линейного оператора. Линейные самосопряженные операторы.
12. Собственные значения и собственные функции операторов. Квантование.
13. Основные свойства собственных функций.

14. Изменение состояния во времени: уравнение Шредингера, сохранение числа частиц, стационарные состояния.
15. Значение нормировки и ортогональности волновой функции.
16. Смысл квадрата модуля и замкнутости волновых функций.
17. Уравнения движения в квантовой механике. Интегралы движения.
18. Операторы: координаты, импульса, момента импульса микрочастицы.
19. Оператор энергии и функции Гамильтона. Гамильтониан.
20. Производные операторов во времени.
21. Матрицы. Действия над ними. Определение среднего значения оператора в матричной форме.
22. Уравнение Шредингера и зависимость операторов от времени в матричной форме.
23. Различные представления операторов.
24. Унитарное преобразование. Унитарные преобразования от одного момента времени к другому. Матрица рассеяния.
25. Гейзенберговское представление. Представление взаимодействия.
26. Гармонический осциллятор.
27. Движение в поле центральной силы.
28. Движение в электромагнитном поле.
29. Теория атома водорода.
30. Квантовые уровни двухатомной молекулы.
31. Движение электронов в периодическом поле.
32. Оператор спина.
33. Спиновые функции.
34. Уравнение Паули.
35. Расщепление спектральных линий в магнитном поле.
36. Свойства полного момента.
37. Теория возмущений. Постановка вопроса.
38. Теория возмущений в отсутсвии вырождения.
39. Теория возмущений при наличии вырождения.
40. Ангармонический осциллятор.
41. Расщепление спектральных линий в электрическом поле.
42. Расщепление спектральных линий атома водорода в электрическом поле.
43. Расщепление спектральных линий в слабом магнитном поле. Эффект Зеемана.
44. Теория возмущений для непрерывного спектра.
45. Магнитные моменты. Токая структура атома. Сверхтонкая структура. Спин-орбитальное взаимодействие.
46. Функции Грина для одноэлектронного уравнения Шредингера. Энергетическая плотность состояний.
47. Формализм вторичного квантования. Уравнение Шредингера.
48. Многочастичная задача. Однодетерминантная волновая функция. Матричные элементы гамильтониана.
49. Представление чисел заполнения. Операторы рождения и уничтожения. Полевые операторы.
50. Гамильтониан и матричные элементы на языке операторов рождения и уничтожения.
51. Принцип тождественности микрочастиц.

52. Качественная теория атома гелия.
53. Уравнение Клейна-Гордона.
54. Вывод уравнения Дирака. Свойства матриц Дирака.
55. Решения уравнения Дирака.

10.УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ «Квантовая теория»

а) **основная литература**:

1. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики.7-е изд., стер., - СПб.: Лань, - 2004. – 664с.
2. Карлов Н.В., Кириченко Н.А. Начальные главы квантовой механики - М.: Физматлит, 2006.-360с.

3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика в 10-и томах. Т. 3: Квантовая механика. – М.: Физматлит, 2008.-800с.

б) **дополнительная литература:**

4. Паршаков А.Н. Веление в квантовую физику: учебн. пособие/ А.Н. Паршаков.- СПб.: Лань, 2010.-352 с. (ЭБС Лань).

5. Зелевинский В.Г. Лекции по квантовой механике.2-е изд., испр. и доп., - Новосибирск: Сиб. унив. изд-во, 2002.- 499с.

6. Балашов В. В., Долинов В. К. Курс квантовой механики: Учебн. пособие.- Ижевск: НИЦ «РХД», 2001.-336с.

7. Гольдин Л. Л., Новикова Г. И. Квантовая физика. Вводный курс.- М.: ИКИ, 2002.- 496с.

8. Фок В. А. Начала квантовой механики.- М.: УРСС, 2008.-376с.

10. Тарасов Л. В. Основы квантовой механики: Учебн. пособие.- М.: УРСС, Книжный дом «Либроком», 2009.-280с.

9. Тимофеевская О. Д., Хрусталев О. А. Лекции по квантовой механике: Учебн. пособие.- Ижевск: НИЦ «РХД», 2007.-316с.

10. Флюгге З. Задачи по квантовой механике. Т1 и 2: Учебное пособие.- М.: ЛКИ/УРСС, 2008.-664с.

11. Мартинсон Л. К., Смирнов Е. В. Квантовая физика: Учебное пособие.- М.: Издательство МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2009.-528с.

12. Киселев В. В. Квантовая механика: Курс лекций.- М.: МЦНМО, 2009.-560с.

в) **программное обеспечение и Интернет-ресурсы:**

№	**Наименование ресурса**	**Краткая характеристика**
1	http://ru.wikipedia.org	Интернет-энциклопедия образовательных изданий, в которой собраны электронные учебники, справочники, а также статьи различной тематики. Удобный поиск по ключевым словам, отдельным темам, отраслям знания.
2	Электронная библиотечная система **«Университетская библиотека-online»** http://www.biblioclab.ru	ЭБС по тематике охватывает всю область естественнонаучных знаний и предназначена для использования в процессе обучения в высшей школе как преподавателями, так и студентами.
3	**Единое окно** доступа к образовательным ресурсам window.edu.ru/window/library	Раздел «математика и естественнонаучное образование» содержит большой перечень учебников и учебно-методических пособий по всем разделам курса молекулярной физики и термодинамики.
4	Электронный информационный ресурс АРБИКОН (http://arbicon.ru).	Содержит разветвленную сеть ссылок на разнообразные образовательные ресурсы в российском интернете.

5	Компьютерная программа «Виртуальная лаборатория»	Позволяет визуализировать труднонаблюдаемые физические явления и эффекты.
6	Электронный ресурс МАРС (http://mars.arbicon.ru).	Электронная система доставки документов. Позволяет найти нужный документ и получить его по электронной почте.
7	(http://uisrussia.msu.ru/is4/main.jsp).	Университетская информационная система России. Обеспечивает просмотр материалов по изучаемым предметам, разработанных в других вузах.
8	http:// e.lanbook.com	Электронная библиотечная система издательства «Лань». Тематический пакет «Физика»
9	http:// www.biblioclub.ru	Электронная библиотечная система «Университетская библиотека - onlane»; специализируется на учеббных материалах для ВУЗов по научно-гуманитарной тематике, а так же содержит материалы по точным и естественным наукам

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ «Квантовая теория»

Оборудование

1. Наличие интерактивной доски и мультимедийного оборудования в лекционной аудитории.

1.3 <u>Методические рекомендации для студентов по самостоятельному изучению дисциплины</u>

1.4.1.Методические рекомендации по подготовке к практическим занятиям

1) Для подготовки к практическим и семинарским занятиям используйте конспекты лекций, учебники и учебные пособия, указанные в списке рекомендуемой основной и дополнительной литературы.
2) Прочитайте тему занятия, выделите те вопросы теории, которые подлежат обсуждению в аудитории.
3) Прочтите конспект лекции, освещающей данную тему.
4) Ответьте на вопросы для самопроверки. При возникновении трудностей с пониманием теоретических основ изучаемой темы, обратитесь к учебнику или методическому пособию. Целесообразно использовать в ходе подготовки учебники разных авторов, где изучаемый вопрос рассматривается с разных методических позиций.
5) При выполнении индивидуальных расчетно-графических заданий внимательно просмотрите решение аналогичных задач, рассматриваемых на учебных занятиях, осмыслите методы и методические приемы, используемые при их решении.
6) Постарайтесь самостоятельно воспроизвести решение этих задач; при возникновении трудностей вернитесь к тому месту в конспекте, который вызвал затруднения. Вновь повторите эту процедуру – до тех пор, пока воспроизведение не станет уверенным.
7) Освоив методику решения данного класса задач, приступайте к решению задач из индивидуального задания. При этом придерживайтесь следующих правил:
   - Запишите краткие условия; выясните, что известно и что требуется найти.
   - Сделайте чертеж, изобразите схему или график, поясняющий суть задачной ситуации;

- Выделите объекты задачи и выясните природу происходящих с ними изменений (процессов). Запишите ключевые отношения, законы, описывающие данное физическое явление.
- Примените эти отношения к системе объектов задачи, получите математическую модель физической системы (процесса), описанной в задаче: как правило, это система уравнений, решение которой дает ответ на требования задачи.
- Оформите аккуратно решение задачи на листе формата А4.

8) На практических и семинарских занятиях целесообразно иметь при себе конспекты лекций, учебники и учебные пособия, в которых изложена теория и методика решения задач по данному учебному курсу.

I. ОБУЧАЮЩИЙ РАЗДЕЛ

1.1. <u>Курс лекций</u>

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 –

$$dw(x,y,z,t) = \rho(x,y,z,t)dxdydz = |\psi(x,y,z,t)|^2 dxdydz \text{ и } \rho(x,y,z,t) = |\psi(x,y,z,t)|^2.$$

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 $k = 2/\lambda = 2\pi p/h = p/\hbar$:

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

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

- общий вид уравнения Шрёдингера.

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

Состояние физической системы, энергия которого постоянна: $\hat{\mathrm{H}}\Psi(x,t) = E\Psi(x,t)$ где $E = const$, называется *стационарным*. Уравнение Шрёдингера для стационарных состояний:

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

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

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

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

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

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

Для стационарных состояний, таким образом, волновая функция имеет вид

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

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

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

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

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

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

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

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:

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

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 = ±1, ±2, ±3,…

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\Delta x \Delta p_x \geq 2\pi\hbar \;\; \Delta x \sim L, \; \Delta p_x \approx \frac{2\pi\hbar}{L} \qquad p_x \approx \overline{p}_x + \Delta p_x, \text{минимальное } \overline{p} = 0, \text{при этом } p_x \approx \Delta p_x \approx \frac{2\pi\hbar}{L}$$

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

Поведение волновой функции

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

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

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

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:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

– уравнение Шрёдингера для линейного гармонического осциллятора.

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

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

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

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

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

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

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

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:

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

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

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

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

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

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

$$n'-2=n$$

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

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

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

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

$$\ldots$$

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

$$\ldots$$

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

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

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

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

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

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

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):

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

' ≈ ~ ≠ ± ≥ ≤ ≡ 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.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

1) $\Psi_n(x)$;

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

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

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

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

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

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

Вывод: энергия осциллятора изменяется дискретно.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Вероятность нахождения x:

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

$x=A\sin\omega t$

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

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.

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

$p=\hbar k$

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

Будем рассматривать прямоугольный потенциальный барьер:

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

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

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

2 область $\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}[E-U_0]\psi_2(x)=0 \quad \Rightarrow \quad \begin{bmatrix} k^2=\frac{2mE}{\hbar^2} \\ \frac{2m}{\hbar}(E-U_0)=\frac{2mE}{\hbar^2}(1-\frac{U_0}{E})=k^2n^2 \end{bmatrix}$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

ρ - плотность вероятности

j_x - поток вероятности

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

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

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

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

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

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

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

$$\psi_1(x) = e^{ikx} + \beta e^{-ikx}$$

$$\psi_2(x) = \alpha e^{iknx} - ik\beta e^{ikx}$$

$$\psi_3(x) = ae^{ikx}$$

$$1 + \beta = \alpha + \beta$$

$$\psi'_1(x) = ike^{iknx}ik\beta e^{ikx}$$

$$\psi'_2(x) = \alpha ike^{iknx} - ikn\beta e^{-iknx}$$

$$\psi'_3(x) = aike^{ikx}$$

$$1 + \beta = \alpha + \beta$$

$$ik - ik = ikn\alpha - ikn\beta$$

$$\alpha e^{iknL} + \beta e^{-iknL} = ae^{ikL}$$

$$ikn\alpha e^{iknL} - ikn\beta e^{iknL} = ike^{ikL}$$

$$1 + \beta = \alpha + \beta \qquad (1+n)\alpha + (1-n)\beta = 2$$

$$1 - \beta = (\alpha - \beta)n$$

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

$$\alpha ne^{iknL} - n\beta e^{-iknL} = ae^{ikL}$$

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

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

$$\psi_2(x) = \alpha e^{iknx} + Be^{-iknx}$$

$$\psi_3(x) = ae^{ikx}$$

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

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

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

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

$$(1+n)\alpha+(1-n)\beta=2$$
$$(1-n)e^{iknL}\alpha+(1+n)e^{-iknL}\beta=0$$
$$\Delta=\begin{vmatrix}1+n & 1-n\\ (1-n)e^{iknL} & (1+n)e^{-iknL}\end{vmatrix}$$
$$\alpha=\frac{1}{\Delta}2(n+1)e^{-iknL}$$
$$\beta=\frac{1}{\Delta}2(n-1)e^{iknL}$$
$$B=-\frac{2i}{\Delta}(1-n^2)\sin(knL)$$
$$a=\frac{4n}{\Delta}e^{-iknL}$$

Обсуждение вопроса.

а) j_0, j_{r,j_α}

$$R=\frac{|j_r|}{|j_0|},\quad D=\frac{|j_\alpha|}{|j_0|}$$
$$j_0=\frac{\hbar k}{m}=\frac{p}{m}=\frac{mv}{m}=v$$
$$j_r=\frac{\hbar}{2im}\left(\psi\frac{d\psi^*}{dx}-\psi^*\frac{d\psi}{dx}\right)=\frac{\hbar}{2im}(Be^{-ikx}-B^*e^{ikx}Be^{ukx}(-ik))=\frac{\hbar}{2im}2|B|^2ik=\frac{\hbar k}{m}|B|^2$$
$$j_\alpha=\frac{\hbar k}{m}|a|^2$$
$$D=|B|^2$$
$$R=|a|^2$$
$D+R=1$; D=1, R=0

б) $E<U_0$

$R\neq 0$

$D\neq 0$

$D+R=1$; D=0, R=1

$D_{\max}$ при $\cos 2knL=1$

$$2knL=2\pi m-m=0;\pm1;\pm2$$
$$k=\frac{\pi}{nL}m\qquad \frac{2\pi}{\lambda}=\frac{\pi}{nL}m$$

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

$$E > U_0$$

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

$D = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)L}}$ 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-?

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\vec{P} = \sum \vec{p}_i$$

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

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

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

2) Оператор импульса.

Каждой физической величине ставится в соответствие оператор импульса $\vec{p}$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

3) Свойства оператора импульса.

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

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

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

$[x, \hat{p}_x] = i\hbar$ $\quad$ $[x, \hat{p}_y] = 0$ $\quad$ $[x_i, \hat{p}_k = i\hbar\delta_{ik}]$ $\quad$ $\delta_{ik} = \begin{cases} 0, i \neq k \\ 1, i = k \end{cases}$

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

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

4) Собственные функции оператора импульса.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

5) <u>Оператор момента импульса.</u>

п.1 ***Изотропность пространства.***

$$\Psi(r,t)$$

$$\delta\vec{r} = [\delta\vec{\varphi}, \vec{r}]$$

$$\vec{V} = [\vec{\omega}, \vec{r}]$$

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

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

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

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

Этот оператор не меняет физических свойств системы.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\begin{bmatrix} [\nabla[\vec{r},\nabla]]\psi(\vec{r}) = [\nabla,[\vec{r},\nabla\psi]] = [\nabla[\vec{r},\nabla\psi] + \nabla[\vec{r},\nabla\psi]] = \\ = (\nabla\psi,\nabla)\vec{r} - \nabla\psi(\nabla,\vec{r}) + \vec{r}\nabla^2\psi - (\vec{r},\nabla)\nabla\psi = \\ = \nabla\psi - 3\nabla\psi + \vec{r}^2\nabla\psi - (\vec{r},\nabla)\nabla\psi \end{bmatrix}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

В квантовой механике оператор импульса:

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

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

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

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

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

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

$$\frac{d\Phi}{\Phi} = i\hbar\mu d\varphi$$
$$\ln\Phi(\varphi) = i\hbar\mu\varphi + \ln C$$
$$\Phi(\varphi) = Ce^{i\hbar\mu\varphi}$$
$$Ce^{i\hbar\mu(\varphi+2\pi)} = Ce^{i\hbar\mu\varphi}$$
$$e^{i\hbar\mu\varphi} = 1$$
$$\cos\hbar\mu 2\pi + i\sin\hbar\mu 2\pi = 1$$
$$\cos\hbar\mu 2\pi = 1$$
$$\sin\hbar\mu 2\pi = 0$$
$$\int_0^{2\pi}\Phi_m{}^*(\varphi)\Phi_m(\varphi)d\varphi = 1$$
$$|C|^2\int_0^{2\pi} e^{-im\varphi}e^{im\varphi}d\varphi = 1$$
$$2\pi|C|^2 = 1 \qquad |C| = \frac{1}{2\pi}$$
$$\begin{Bmatrix} C = |C|e^{i\alpha} \\ C^* = |C|e^{-i\alpha} \end{Bmatrix} \qquad \left|e^{\pm i\alpha}\right| = 1$$
$$\Phi_m(\varphi) = Ce^{im\varphi}$$
$$\Downarrow$$
$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}$$

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

Замечание: Полный набор физических величин.

Набор физических величин квантового числа, полностью характеризующих состояние в системе, называется полным набором.

$$\hat{\vec{L}}^2 = -\hbar\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\right]$$
$$\hat{\vec{L}}^2 = -\hbar\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) - \frac{\hbar^2}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$
$$\hat{\vec{L}}^2 = -\hbar\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{\hat{\vec{L}}_z^2}{\sin^2\theta}$$
$$[\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_z] = 0$$
$$\Psi(\theta,\varphi) = \Theta(\theta)\Phi_m(\varphi)$$

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

$$\hat{\vec{L}}^2\Psi(\theta,\varphi) = \lambda\Psi(\theta,\varphi)$$
$$-\hbar^2\Phi_m(\varphi)\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\Phi_m(\varphi)\Theta(\theta) = \lambda\Phi\Theta$$
$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + (\frac{\lambda}{\hbar^2} - \frac{m^2}{\sin^2\theta})\Theta(\theta) = 0$$

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) $m = 0$

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

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

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

$$\int_{-1}^{+1} P_l{}^*(x) L_{l1}(x) dx = \begin{cases} 0, l \ne l_1 \\ \dfrac{2}{2l+1}, l = l_1 \end{cases} \qquad \lambda = l(l+1)$$

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

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:
$|m| \le l$

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

$-l, -l+1, \ldots, -2, -1, m, +1, +2, \ldots, +l$ $\qquad m$ -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.

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

$$U = U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$$

$$\begin{cases} M\dfrac{d^2\vec{R}}{dt^2} = 0 \\ \mu\dfrac{d^2\vec{r}}{dt^2} = -\dfrac{\partial U}{\partial r}\dfrac{\vec{r}}{r} \end{cases} \qquad \vec{R} = \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1 + m_2}$$

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

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

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

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = E\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$$

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

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

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

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

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

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

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

$\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\Psi(\vec{r}) + [E - U(r)\Psi(\vec{r}) = 0$ - 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

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

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

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

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

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.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$E=-|E|$$

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

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

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

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

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

$$E<0$$

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

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

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

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

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

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

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 $\sum_{\nu} C_\nu \rho^\nu \approx e^\rho$

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

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

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

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

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

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

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

$$E_n\to\sum_0^{n-1}\sum_{m=1}^{l}m=\sum_{l=0}^{n}(2l+1)n^2$$

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).

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

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

$$\begin{cases}n=1,2,3,\ldots\\ l=1,2,3,\ldots n-1\\ m=0,\pm1,\pm2,\ldots\pm l\end{cases}$$

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

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

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

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

$$\mu_{zp}=\frac{e\hbar}{2m_p c}\qquad L_z=m\hbar\,,m=0;\pm1;\pm2;\ldots$$

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

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

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

$$W=-\mu_z H\pm\frac{eA}{2m_e c}\cdot\hbar m, m=0;\pm1;\ldots$$

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

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

$$\hat{\vec{\Upsilon}}=\hat{\vec{L}}+\hat{\vec{S}}$$

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

$$\hat{\vec{\Upsilon}}=\hat{\vec{L}}+\hat{\vec{S}}$$

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

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

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

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

$$\hat{\vec{\Upsilon}}_z=\hat{\vec{L}}_z+\hat{\vec{S}}_z$$

$$L_z=m\hbar \quad m=0;\pm1;\pm2;\ldots\pm l$$

$$s_z=\pm\hbar$$

$$\left|\hat{\Upsilon}_z\right|=\left|\hat{L}_z+\hat{S}_z\right|$$

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

$$\hat{L}_z=m\hbar\ ,\ m=0;\pm1;\pm2;\ldots\pm l$$

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

$$n,l,m,s_z$$
$$\Downarrow$$
$$n,j,m_j,s_z$$

СПИН ЭЛЕКТРОНА

Экспериментальное обоснование существования спина.

3 классических вывода:

1) Дуплетный спектр щелочных металлов.

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

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

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

$$\vec{L} = [\vec{R}_c, m \cdot V_c] + \sum_n [\vec{r}_n, \vec{p}_n]$$

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

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

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

$$l = 1$$

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

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

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.

$$\hat{P}_{12}\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$$

$$\hat{P}_{12}\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \lambda\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

$$\hat{P}_{12}\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \hat{P}_{12}\hat{P}_{12}\Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = \hat{P}_{12}\lambda\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \lambda\vec{P}_{12}\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \lambda^2\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

$$\lambda^2 = 1$$

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

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_N)$$

$$\vec{P}_{ik}\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_i, \ldots, \vec{r}_k, \ldots \vec{r}_N) = \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_k, \ldots, \vec{r}_i, \ldots \vec{r}_N)$$

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

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

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

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

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

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

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

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:

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

Волновая функция:

$$\Psi_{n1n2}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=\Psi_{n1}(\vec{r}_1)\Psi_{n2}(\vec{r}_2)$$

Проверим это:

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

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

$$\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=\sum_{n1}\sum_{n2}C(n_1,n_2)\Psi_{n1}(\vec{r}_1)\Psi_{n2}(\vec{r}_2)$$

$$P_{12}\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=-\sum_{n1}\sum_{n2}C(n_1,n_2)\Psi_{n1}(\vec{r}_1)\Psi_{n2}(\vec{r}_2)$$

$$\hat{P}_{12}\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=\sum_{n1,n2}C(n_1,n_2)\Psi_{n1}(\vec{r}_2)\Psi_{n2}(\vec{r}_1)=\sum_{n1,n2}C(n_1,n_2)\Psi_{n2}(\vec{r}_2)\Psi_{n1}(\vec{r}_1)$$

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

$$n_1=n_2=n$$

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

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

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

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

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

$$\left|C(n,n)\right|^2=0$$

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 $\Psi_n(x)$.

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

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

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

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

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

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

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.

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

$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}$ $\qquad$ $\hat{W} = \lambda\hat{\omega}$ $\qquad$ λ-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:

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

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

Атом гелия.

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

$$\left\{ E_n = -\frac{me^2 z^2}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \right\}$$

$$n = 1,2,3,...$$
$$l = 0,1,2,3,...n-1$$
$$m = 0;\pm1;\pm2;\pm3;...\pm l$$

$$n \to n^2$$

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 $\hat{\vec{\mu}}_p$ - сверхтонкая структура.

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

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

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

3)Лэмбовский сдвиг ≈ 4 Å.

П.1 Качественная теория атома гелия.

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

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

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

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

$$\Psi_{n1,n2}(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \Psi_{n1}(r_1)\Psi_{n2}(r_2)$$

Введём спиновые функции:

$$S_\alpha(+\frac{\hbar}{2}) = \begin{cases} 1, \alpha = +\frac{1}{2} \\ 0, \alpha = -\frac{1}{2} \end{cases}$$

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

$$\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\hat{s}_{1z},\hat{s}_{2z}) = \Phi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\cdot S(s_{1z},s_{2z})$$

$$\Psi(\vec{r}_2,\vec{r}_1,\hat{s}_{2z},\hat{s}_{1z}) = \Phi(\vec{r}_2,\vec{r}_1)\cdot S(s_{1z},s_{2z}) = -\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)S(s_{1z},s_{2z})$$

1. $\Phi_a(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = -\Phi_a(\vec{r}_2,\vec{r}_1)$

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

2. $\Phi_s(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \Phi_s(\vec{r}_2,\vec{r}_1)$

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

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

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

Синглет

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

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

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

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

Триплет

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

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

Каковы энергетические уровни?

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

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

$$\hat{H} = \hat{H}_{10} + \hat{H}_{20} + \hat{W} \qquad \int \Phi_s^* \hat{W} \Phi_s d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

$$\int \Phi_a^* \hat{W} \Phi_a d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

Для симметричной волновой функции:

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

Для антисимметричной волновой функции

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

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

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

II. КОНТРОЛИРУЮЩИЙ РАЗДЕЛ

2.1. Примерное содержание экзаменационных билетов

АмГУ

Утверждено на заседании кафедры — Кафедра физики

«_____»_________________20 г.

Протокол № _____________ — Факультет ИФФ

Зав. кафедрой — Курс 3

Утверждаю: — Дисц. Квантовая теория

БИЛЕТ № 1

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

БИЛЕТ 2

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

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.

БИЛЕТ 4

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

БИЛЕТ 5

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

БИЛЕТ 6

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

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.

БИЛЕТ 8

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

БИЛЕТ 9

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

БИЛЕТ 10

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

БИЛЕТ 11

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

БИЛЕТ 12

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

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.

БИЛЕТ 14

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

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.

БИЛЕТ 16

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

БИЛЕТ 17

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

БИЛЕТ 18

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

БИЛЕТ 19

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

БИЛЕТ 20

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

БИЛЕТ 21

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

БИЛЕТ 22

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

БИЛЕТ 23

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