Стационарная теория возмущений

[fmodorov.github.io

① Невырожденный случай. Поправки 1-го и 2-го порядков

$$\hat H = \hat H_0 + \hat V, \ (\hat V \ll \hat H_0),$$

$$\{\psi_n^{(0)}, \epsilon_n^{(0)}\}, \quad H_0 \psi^{(0)} = \epsilon^{(0)} \psi^{(0)}$$

$$\hat H \psi = (\hat H_0 + \hat V)\psi = \epsilon \psi$$

$$\psi = \sum_m c_m \psi_m^{(0)} \ ; \quad \Big| \int \psi_k^* \ldots dq$$

$$\Rightarrow \epsilon_k^{(0)} c_k + \sum V_{km} c_m = c_k \epsilon$$

$$\Rightarrow \boxed{(\epsilon - \epsilon_k^{0}) c_k = \sum_m V_{km} c_m}$$

$$\epsilon = \epsilon^{(0)} + \epsilon^{(1)} + \ldots, \quad c_m = c_m^{(0)} + c_m^{(1)} + \ldots$$

$$\begin{cases} c_{m=n}^{(0)} = 1 \\ c_{m\neq n}^{(0)} = 0 \end{cases}$$

$$\psi = \psi_n = \sum c_m \psi_m^{(0)}, \quad \epsilon_n = \epsilon_n^{(0)} + \epsilon_n^{(1)}, \quad c_m = c_m^{(0)} + c_m^{(1)}$$

$$\Rightarrow (\epsilon_n^{(0)} + \epsilon_n^{(1)} - \epsilon_k^{(0)})(c_k^{(0)} + c_k^{(1)}) = \sum V_{km}(c_m^{(0)} + c_m^{(1)})$$

$$(\epsilon_n^{(0)} - \epsilon_k^{(0)}) c_k^{(0)} \equiv 0$$

$$\Rightarrow (\epsilon_n^{(0)} - \epsilon_k^{(0)}) c_k^{(1)} + \epsilon_n^{(1)} c_k^{(0)} = \sum V_{km} c_m^{(0)}$$

$k = n$: $\boxed{\epsilon_n^{(1)} = V_{nn}}$, $c_n^{(1)} = ?$

$k \neq n$: $\boxed{c_k^{(1)} = \dfrac{V_{kn}}{\epsilon_n^{(0)} - \epsilon_k^{(0)}}}$

$$\boxed{\epsilon_n = \epsilon_n^{(0)} + V_{nn}}$$

$$\psi_n = \psi_n^{(0)}(1 + c_n^{(1)}) + \sum_{m\neq n} \frac{V_{mn}}{\epsilon_n^{(0)} - \epsilon_m^{(0)}} \psi_m^{(0)}$$

$$\int |\psi_n|^2 dq = 1 = 1 + \cancel{\mathrm{Re}\, c_n^{(1)}} \to 0$$

$$\Rightarrow c_n^{(1)} = i\alpha^{(1)}, \quad \psi_n^{(0)}(1 + i\alpha^{(1)}) = \psi_n^{(0)} e^{i\alpha^{(1)}}$$

$$\boxed{\psi_n = \psi_n^{(0)} + \sum_{m\neq n} \frac{V_{mn}}{\epsilon_n^{(0)} - \epsilon_m^{(0)}} \psi_m^{(0)}}$$

$$\boxed{|V_{nm}| \ll |\epsilon_n^{(0)} - \epsilon_m^{(0)}|}, \ (V_{nn} = 0)$$

$$\epsilon_n = \epsilon_n^{(0)} + \epsilon_n^{(1)} + \epsilon_n^{(2)}, \quad c_m = c_m^{(0)} + c_m^{(1)} + c_m^{(2)}$$

$$(\epsilon_n^{(0)} + \epsilon_n^{(1)} + \epsilon_n^{(2)} - \epsilon_k^{(0)})(c_k^{(0)} + c_k^{(1)} + c_k^{(2)}) = \sum V_{km}(c_m^{(0)} + c_m^{(1)} + c_m^{(2)})$$

$$\boxed{(\epsilon_n^{(0)} - \epsilon_k^{(0)}) c_k^{(2)} + \epsilon_n^{(1)} c_k^{(1)} + \epsilon_n^{(2)} c_k^{(0)} = \sum_m V_{km} c_m^{(1)}}$$

$k = n$: $c_n^{(2)} = ?$

$$\epsilon_n^{(2)} = \sum_m V_{nm} c_m^{(1)} - \epsilon_n^{(1)} c_n^{(1)} = \sum_{m\neq n} V_{nm} c_m^{(1)} =$$

$$\boxed{\epsilon_n^{(2)} = \sum{}' \frac{|V_{nm}|^2}{\epsilon_n^{(0)} - \epsilon_m^{(0)}}}$$

$$\epsilon_n = \epsilon_n^{(0)} + V_{nn} + \sum{}' \frac{|V_{nm}|^2}{\epsilon_n^{(0)} - \epsilon_m^{(0)}}$$

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \sum_m{}' \frac{V_{mn}}{\epsilon_n^{(0)} - \epsilon_m^{(0)}} \psi_m^{(0)}$$

Стационарная теория возмущений при вырождении

$\epsilon_n^{(0)} \to \psi_n^{(0)}, \psi_{n'}^{(0)} \dots \quad k = n, n' \dots$

$\epsilon = \epsilon_k^{(0)} + \epsilon^{(1)}, \quad c_k = 0, \quad k \neq n, n' \dots$

$\epsilon_n^{(1)} c_n^{(0)} = \sum V_{nn'} c_{n'}^{(0)}$

$$\boxed{\sum_{n'=1,2\dots s} \left(V_{nn'} - \epsilon^{(1)} \delta_{nn'}\right) c_{n'} = 0}$$

$$|V_{nn'} - \delta_{nn'} \epsilon^{(1)}| = 0$$

$\Rightarrow$ s-корней

$\Rightarrow \epsilon_{ni} = \epsilon_n^{(0)} + \epsilon_i^{(1)}$

$$\sum_{n'} \left(V_{nn'} - \epsilon_i^{(1)} \delta_{nn'}\right) c_{n',i}^{(0)} = 0$$

$\epsilon_i^{(1)} \to \{c_{ni}^{(1)}\}$

$\Phi_i^{(0)} = \sum c_{ni}^{(0)} \psi_n^{(0)}$

$$\int \Phi_i^{*(0)} \Phi_j^{(0)} dq = \delta_{ij} = \sum_{n=1\dots s} c_{ni}^{(0)} c_{nj}$$

$$\langle \Phi_i^{(0)} | V | \Phi_j^{(0)} \rangle = \sum_{nn'} c_{ni}^{*(0)} \left(V_{nn'} c_{n'j}^{(0)}\right) = \epsilon_j^{(1)} \delta_{ij}$$

Случай двух близких уровней

$H_0 \quad \psi_1^{(0)} \quad \psi_2^{(0)}$

$\epsilon_1^{(0)} \quad \epsilon_2^{(0)}$

$$|V_{ij}| \sim |\epsilon_1^{(0)} - \epsilon_2^{(0)}|$$

$(H_0 + V)\psi = \epsilon\psi \Leftarrow \psi = c_1^{(0)}\psi_1^{(0)} + c_2^{(0)}\psi_2^{(0)}$

$$\Rightarrow \left.\begin{aligned} (\epsilon_1^{(0)} + V_{11}) c_1^{(0)} + V_{12} c_2^{(0)} &= \epsilon c_1^{(0)} \\ (\epsilon_2^{(0)} + V_{22}) c_2^{(0)} + V_{21} c_1^{(0)} &= \epsilon c_1^{(0)} \end{aligned}\right\} \det = 0$$

$$\epsilon_{1,2} = \frac{1}{2}\left(\epsilon_1^{(0)} + V_{11} + \epsilon_2^{(0)} + V_{22}\right) \pm$$
$$\pm \sqrt{\left(\epsilon_1^{(0)} - \epsilon_2^{(0)} + V_{11} - V_{22}\right)^2 + 4|V_{12}|^2}$$

выводы:

1) $V(1)$

2) $V \ll H_0$

не пересекаются

Спин электрона

$\Psi(x,y,z;\sigma)$

дискретн. перемен. (поляризац)

$\int|\Psi(\vec r,\sigma)|^2 d^3r = W_\sigma$

$\sum_\sigma |\Psi(\vec r,\sigma)|^2 dV = dW$

$\sum_\sigma \int|\Psi(\vec r,\sigma)|^2 dV = 1$

$$\Psi(\vec r,\sigma) = \begin{pmatrix}\Psi_1(\vec r)\\ \Psi_2(\vec r)\end{pmatrix}_\sigma = \Psi_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+\Psi_2\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

базисные спиноры

$\chi_{m_s=+\frac12}(\sigma)=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$

$\chi^{(\sigma)}_{m_s=-\frac12}=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$

Оператор спина

Р-м $\hat R_{\delta\alpha_k} = 1 - i\hat J_k\delta\alpha_k$

$\hat R^{-1}_{\delta\alpha_k}\hat H\hat R_{\delta\alpha_k}=\hat H \Rightarrow [\hat J_k,\hat H]=0$

$\Rightarrow J_k = l_k+S_k$, $\boxed{[S_i,S_j]=i\varepsilon_{ijk}S_k}$

$\Downarrow$

$[\hat S^2, S_z]=0$

$m_s=\pm 1/2$, $S=\frac12$

$\lambda = s(s+1)=3/4$

Р-м: $\Psi'(\sigma) = (\hat S\Psi)(\sigma)=\sum_{\sigma'} S_{\sigma\sigma'}\Psi(\sigma')$

$S_{m_s'm_s} = \sum_{\sigma\sigma'}\chi^*_{m_s'}(\sigma)S_{\sigma\sigma'}\chi_{m_s}(\sigma')\Leftrightarrow$

$f_{mn}=\int\Psi_m^*\hat f\Psi_n dq$

$(S_z)_{m_s'm_s}=m_s\delta_{m_s'm_s}=\frac12\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\equiv (S_z)_{\sigma\sigma'}$

$(\vec S^2)_{m_s'm_s} = s(s+1)\delta_{m_s'm_s}=\frac34\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}=\boxed{(\vec S^2)_{\sigma\sigma'}}$

$S_x=\frac{S_+ + S_-}{2}=\frac12\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$

$S_y=\frac12\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}$

матрицы Паули

$\sigma_x = \begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$ $\sigma_y=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}$ $\sigma_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$

$$\begin{cases}\hat\sigma_i^+=\hat\sigma_i=\hat\sigma_i^{-1}\\ \sigma_i^2=I,\ \operatorname{tr}\sigma_i=0\end{cases}$$

$$\begin{cases}\sigma_i\sigma_j-\sigma_j\sigma_i=2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k\\ \sigma_i\sigma_j+\sigma_j\sigma_i=2\delta_{ij}I\end{cases}$$

$$\boxed{\sigma_i\sigma_j=\delta_{ij}\hat I+i\varepsilon_{ijk}\sigma_k}$$

Оператор поворота

$e^{-i\sigma_y\theta/2}=\hat I\cos\theta/2 - i\sigma_y\sin\frac\theta2=$

$\hat R_{n_y\theta}=\begin{pmatrix}\cos\theta/2&-\sin\theta/2\\ \sin\theta/2&\cos\theta/2\end{pmatrix}$

Подействуем на: $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\theta/2\\ \sin\theta/2\end{pmatrix}=\chi_{m_s'}$

$\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-\sin\theta/2\\ \cos\theta/2\end{pmatrix}=\chi_{m_s'}$

$\hat R_{n_z\varphi}=\begin{pmatrix}e^{-i\frac\varphi2}&0\\0&e^{i\frac\varphi2}\end{pmatrix}$

$\hat R_{n_z\varphi}\hat R_{n_y\theta}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\frac\theta2 e^{-i\frac\varphi2}\\ \sin\frac\theta2 e^{i\varphi/2}\end{pmatrix}=\chi^{(\sigma)}_{m_s'=\frac12}$

$\hat R_{n_z\varphi}\hat R_{n_y\theta}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-\sin\frac\theta2 e^{-i\varphi/2}\\ \cos\frac\theta2 e^{i\varphi/2}\end{pmatrix}=\chi^{(\sigma)}_{m_s'=-\frac12}$

$\langle\chi_{m_s'=1/2}|\hat{\vec S}|\chi_{m_s'=\frac12}\rangle=\frac12(\sin\theta\cos\varphi,\ \sin\theta\sin\varphi,\ \cos\theta)=\frac12\vec n_{z'}$

$(\vec S,\vec n_{z'})|\chi_{m_s'=\pm\frac12}\rangle = m_s'|\chi_{m_s'=\pm1/2}\rangle =$

$=\pm\frac12|\chi_{m_s'}\rangle$

Уравнение Паули

$$\hat H = \frac{\left(\vec p - \frac{e}{c}\vec A\right)^2}{2m} + U(r) - \vec\mu_e \vec{\mathcal H} = \hat H_0 + \hat H_s$$

$$\hat H_s = -(\vec\mu_e \vec{\mathcal H}) = +2\frac{|e|\hbar}{2mc}(\vec s, \vec{\mathcal H}) =$$

$$= 2\mu_Б(\vec s, \vec{\mathcal H})$$

$$2 \to \left(2\left(1+\frac{\alpha}{2\pi}\right)\right) \simeq 2{,}00116\ldots$$

$$\mu_Б \to \mu_p = \frac{|e|\hbar}{2m_p c}\,2{,}79 = \mu_я \cdot 2{,}79$$

$$\mu_n = -\mu_я\, 1{,}91$$

$$\Psi(r,\sigma,t) = \psi(r,t)\,\chi(\sigma,t)$$

$$\begin{cases} i\hbar\dfrac{\partial\psi}{\partial t} = H_0\psi \\ i\hbar\dfrac{\partial\chi}{\partial t} = H_s\chi \end{cases}$$

2-ая кл. задача

1) Расщепл. ур. энергии по S_z – Зееман

2) Прецес. $\vec s$ в $\mathcal H$

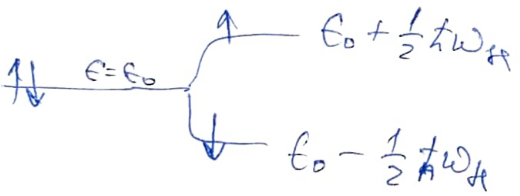
$$\chi(\sigma,t) = \chi(\sigma)\, e^{-i\varepsilon_s t/\hbar}$$

$$2\mu_Б(\vec s\,\vec{\mathcal H})\chi = \varepsilon_s\chi$$

$$(\vec s\,\vec n_{\mathcal H})\chi = \frac{\varepsilon_s}{2\mu_Б\mathcal H}\chi = m_s'\chi$$

$$\Rightarrow \quad \varepsilon_s = \pm\frac{1}{2}\,2\mu_Б\mathcal H = \pm\frac{1}{2}\left(\frac{|e|\mathcal H}{mc}\right)\hbar \Rightarrow$$

$$\boxed{\varepsilon_s = \pm\frac{1}{2}\hbar\omega_{\mathcal H}}$$



$$\chi(\sigma,t) = c_1\chi_{m_s'=+\frac{1}{2}}(\sigma)\, e^{-i\varepsilon_{m_s'=\frac{1}{2}}\frac{t}{\hbar}} +$$

$$+ c_2\chi_{m_s'=-\frac{1}{2}}(\sigma)\, e^{-i\varepsilon_{m_s'=-\frac{1}{2}}\frac{t}{\hbar}}$$

$$\mathcal H \parallel z$$

$$\Rightarrow \chi(\sigma,t) = c_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} e^{-i\varepsilon_{1/2}\frac{t}{\hbar}} + c_2\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} e^{-i\varepsilon_{-1/2}\frac{t}{\hbar}}$$

$$\chi(\sigma,t) = \begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\, e^{-i\frac{\omega t}{2}} \\ \sin\frac{\theta}{2}\, e^{+i\frac{\omega t}{2}}\end{pmatrix}$$

Прецессия!

Сложение моментов

$\hat H = \hat H_{10} + \hat H_{20} + V_{12}$

$\vec l_1, \vec l_2;\ \vec l_1^{\,2}, \hat l_{1z}, \vec l_2^{\,2}, \hat l_{2z};\ \vec S_1, \vec S_2 \leftarrow \underbrace{\vec j_1 \vec j_2}_{\text{общее обозн.}}$

$\psi_{j_1 m_1}\ \psi_{j_2 m_2}$

$\dots\ g = (2j_1+1)(2j_2+1)$

$[\hat H, \hat{\vec j}_{1,2}] \neq 0$

$V_{12} = \dfrac{e^2}{|\vec r_1 - \vec r_2|}$

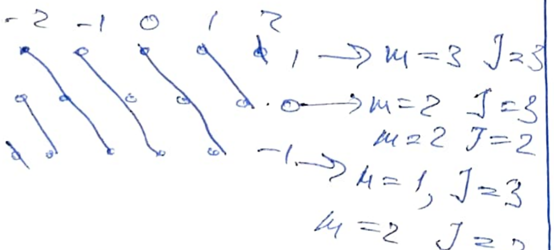
$\psi = \sum_{m_1 m_2} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}\, \psi_{j_1 m_1} \psi_{j_2 m_2}$

$\hat{\vec J} = \hat{\vec j}_1 + \hat{\vec j}_2 \qquad [\hat H\, \hat{\vec J}] = 0$

$\vec J^2,\ \hat J_z,\ \hat{\vec j}_1^{\,2},\ \hat{\vec j}_2^{\,2}$

$\hat J_z = \hat j_{1z} + \hat j_{2z} \qquad m = m_1 + m_2$

$\vec J^2 - ?$ $\quad J \quad j_1 = 2 \quad j_2 = 1 \quad 5 \times 3 = 15$



Видим, что $(J)_{max} = m_{max} = j_1 + j_2$

$(J)_{min} = m_{1max} - m_{2max} = j_1 - j_2$

$$\boxed{J = j_1 + j_2, \dots |j_1 - j_2|}$$

$\{|j_1 m_1\rangle\, |j_2 m_2\rangle\} \to \{|J, m, j_1 j_2\rangle\}$

$(\vec l \vec S)$ — взаимодействие

$\hat V(l,s) = -\vec\mu_e \vec H_{AT} = 2\mu_Б \vec S \frac{1}{c}[\vec E_{AT} \vec v] =$

$= 2\mu_Б \vec S \frac{1}{c}[-\vec\nabla \frac{|e|}{r} \vec v] = 2\mu_Б \frac{|e|\hbar}{mc} \frac{(\vec l \vec S)}{r^3} =$

$= \dfrac{e^2\hbar^2}{m^2c^2}\cdot\dfrac{(\vec l\vec S)}{r^3} \leftarrow \frac12$ Томас половинка

$\langle J, m, l, s | \dfrac{e^2\hbar^2 (\vec l\vec S)}{2m^2c^2 r^3} | J, m, l, s\rangle =$

$\vec J = \vec j_1 + \vec j_2$

$2(\vec j_1 \vec j_2) = \vec J^2 - \vec j_1^{\,2} - \vec j_2^{\,2} \Rightarrow J(J+1) - j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)$

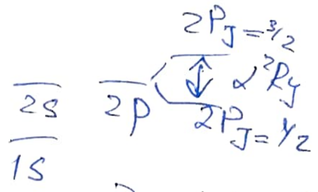
$2(\vec j_1 \vec J) \Rightarrow J(J+1) + j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)$

$2(\vec j_2 \vec J) \Rightarrow J(J+1) - j_1(j_1+1) + j_2(j_2+1)$

$= \dfrac{e^2\hbar^2}{2m^2c^2}\langle nJm|\frac{1}{r^3}|nJm\rangle \times$

$\times \frac12 \left(J(J+1) - l(l+1) - \frac34\right) = \begin{cases} \frac{l}{2} \leftarrow J_1 \\ -\frac{l+1}{2} \leftarrow J_2 \end{cases}$

$$\boxed{J_1 = l + \frac12 \qquad J_2 = l - \frac12}$$



$\dfrac{e^2\hbar^2}{2m^2c^2}\dfrac{1}{a_Б^3} = \dfrac{e^2}{2a_Б}\cdot\left(\dfrac{\hbar}{mc}\dfrac{1}{a_Б}\right)^2$

$\dfrac{\hbar}{mc}\dfrac{1}{\hbar^2/me^2} = \dfrac{e^2}{\hbar}\dfrac{1}{c} = \alpha$

$= \alpha^2 Ry.$

Волн. ф-ции и коэфф. Кл.-Горд.

$$\psi_{SM} = \psi_{11} = \chi^{(1)}_{1/2}\chi^{(2)}_{1/2}$$

$$J_- = j_{1-} + j_{2-}$$

$$J_-|JM\rangle = \sqrt{(J+M)(J-M+1)}\,|J\,M-1\rangle$$

$$\Rightarrow \sqrt{2}\psi_{10} = \frac{\chi^{(1)}_{1/2}\chi^{(2)}_{-1/2} + \chi^{(1)}_{-1/2}\chi^{(2)}_{1/2}}{\sqrt{2}}$$

$$\sqrt{2}\psi_{1-1} = \chi^{(1)}_{-1/2}\chi^{(2)}_{-1/2}$$

$$\psi_{00} = \frac{\chi^{(1)}_{1/2}\chi^{(2)}_{-1/2} - \chi^{(1)}_{-1/2}\chi^{(2)}_{1/2}}{\sqrt{2}}$$

$l \quad s$

$1 + 1/2 \qquad J = 3/2,\ 1/2$

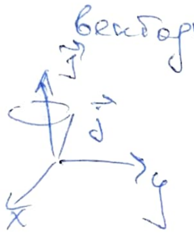
$$\psi_{3/2\,3/2} = Y_{11}(\theta,\varphi)\chi_{1/2}$$

$$\psi_{3/2\,1/2} = \sqrt{\tfrac{2}{3}}\,Y_{10}(\theta,\varphi)\chi_{1/2} + \sqrt{\tfrac{1}{3}}\,Y_{11}(\theta,\varphi)\chi_{-1/2}$$

$$\langle \tfrac{3}{2}\,\tfrac{1}{2}|\hat{l}|\tfrac{3}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle = \left(0,\ 0,\ 0\cdot\tfrac{2}{3} + 1\cdot\tfrac{1}{3}\right)$$

$$\langle \tfrac{3}{2}\,\tfrac{1}{2}|\hat{s}|\tfrac{3}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle = \left(0,\ 0,\ \tfrac{1}{2}\cdot\tfrac{2}{3} + \left(-\tfrac{1}{2}\right)\tfrac{1}{3}\right)$$

векторн. модель



$$\overline{\vec{j}_{\parallel}} = \frac{(\vec{j}\,\vec{J})}{|J|}$$

$$\langle \vec{j}\rangle = \frac{\vec{J}}{|J|}\,j_{\parallel} = \frac{\vec{J}}{|J|}\,\frac{(\vec{j}\,\vec{J})}{|J|}$$

Правила отбора

$\langle n', J', m' | \hat{f} | n, J, m \rangle \neq 0$ скаляр f

$e^{-i\vec{J}\vec{n}\delta\alpha} \hat{f} e^{+i\vec{J}\vec{n}\delta\alpha} = \hat{f} = \hat{f} - i\delta\alpha\vec{n}[\vec{J}\hat{f}] + \dots$

$[\vec{J}, \hat{f}] = 0$

$[J_z, f] = [\hat{\vec{J}}^2, f] = 0$

$\Rightarrow \langle n'J | \hat{f} | nJ \rangle \delta_{J'J} \delta_{m'm}$;

т.е. $\langle m' | J_z f - f J_z | m \rangle =$

$= (m'-m) \langle m' | f | m \rangle = 0$

$\langle n'J\, m+1 | J_+ \hat{f} - \hat{f} J_+ | nJm \rangle = 0$

$= \langle n'J\, m+1 | J_+ | n'Jm \rangle \langle n'Jm | \hat{f} | nJm \rangle -$

$- \langle n'J\, m+1 | \hat{f} | nJ\, m+1 \rangle \langle nJ\, m+1 | J_+ | nJm \rangle$

Примеры:

скаляр: $\hat{H}, \vec{e}^2, \vec{S}^2, (\vec{l}\vec{S})$

вектор: $\vec{e}, \vec{S}, \vec{z}, \vec{p}, \vec{J} = \vec{j}_1 + \vec{j}_2$

$$\boxed{[\hat{J}_i \hat{V}_j] = i\varepsilon_{ijk} \hat{V}_k.}$$

$V_i \to V_\pm = V_x \pm iV_y,\ V_z$

$[\hat{J}_z \hat{V}_z] = 0$

$[\hat{J}_z \hat{V}_\pm] = \pm V_\pm$

$\langle n'J'm' | V_z | nJm \rangle \sim \delta_{m'm}$

$\langle n'J'm' | V_\pm | nJm \rangle \sim \delta_{m', m\pm1}$

$[\hat{J}^2 [\hat{J}^2 \vec{V}]] = 2(\hat{J}^2\vec{V} + \vec{V}\hat{J}^2) - 4\vec{J}(\vec{V}\vec{J})$

---

1) $\langle n'Jm' | \vec{V} | nJm \rangle =$

$= \langle n'Jm' | \vec{J} | n'Jm \rangle \dfrac{\langle n'Jm | (\vec{V}\vec{J}) | nJm \rangle}{\dots}$

2) $J' \neq J \quad \langle \dots J' | \vec{J} | \dots J \rangle = \overset{J(J+1)}{0}$

$\Rightarrow \langle n'J'm' | \vec{V} | nJm \rangle \cdot ((J'+J+1)^2 - 1) \cdot$

$\cdot ((J'-J)^2 - 1) = 0$

$J' = J+1, J, J-1.$

$\vec{e} = \frac{1}{\hbar}[\vec{z} \times \vec{p}]$

$\langle l'm' | \vec{z}_\pm | lm \rangle$

$(-1)^{l'} \quad -(-1)^l$ $\quad (l' \neq l)$

$l' = l+1, l-1$

Тождественные частицы

$|\hat{P}_{ij} \Psi(1 \dots i j \dots N)|^2 = |\Psi(1 \dots j i \dots N)|^2 =$

$= |\Psi(1 \dots i \dots j \dots N)|^2, \quad i \to \xi_i = (x_i y_i z_i \sigma_i)$

$\hat{P}_{ij} \Psi(ij) = \Psi(ji) = e^{i\alpha} \Psi(ij)$

$\Rightarrow \boxed{e^{i\alpha} = \pm 1}$

$\hat{H}_0 = \hat{H}'_0(1) + \dots + \hat{H}'_0(N)$

$\Psi = \Psi_{p_1}(\xi_1) \Psi_{p_2}(\xi_2) \dots \Psi_{p_N}(\xi_N)$

$p_i = \begin{cases} n_i\, l_i\, m_{l_i}\, m_{s_i} \\ n_i\, l_i\, j_i\, m_{j_i} \end{cases}$

$\Psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\Psi_{p_1}(\xi_1)\Psi_{p_2}(\xi_2) + \Psi_{p_1}(\xi_2)\Psi_{p_2}(\xi_1) \right)$

$p_1 \neq p_2$

$\Psi_S = \Psi_p(\xi_1)\, \Psi_p(\xi_2)$

$p_1 = p_2 = p$

$\Psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} (\quad - \quad)$

$\Psi_A \equiv 0, \quad p_1 = p_2 = p$

Атом He

Многоэлектронные атомы

$$\hat H = \sum_{i=1}^{N}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i - \frac{Ze^2}{r_i}\right) + \sum_{i<j}^{N}\frac{e^2}{|\vec r_i - \vec r_j|} \rightarrow \frac{N(N-1)}{2}$$

$H\psi = E\psi$ → сложно решить

$\psi_i(\vec r_i)$ → индивид. в.ф. для e^-

→ (Хартри – Фок)

$$V(\vec r_i) = -\frac{Ze^2}{r_i} + \sum_{j\neq i}\int \frac{e^2|\psi_j(r')|^2}{|\vec r_j - \vec r'|}\, d^3 r'$$

вз-е с ядром

плотность вер-ти e

$$\begin{cases}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i + V(r_i)\right)\psi_i(r_i) = \varepsilon_i\psi_i(r_i) \\ i = 1\ldots N\end{cases}$$

самосогласов. поле

$$V(r_i) = \frac{1}{4\pi}\int V(\vec r_i)\, d\Omega_i$$

$V_{с.ц-с.п.}(r_i)$

самосогл.-центр-симм. поле

$$\psi_i(\vec r_i) = \psi_{nlm}(\vec r_i) = \frac{R_{nl}(r_i)}{r_i}Y_{lm}(\Omega_i)$$

$$\psi(\vec r_1 \ldots \vec r_N) = \psi_1(\vec r_1)\cdot\ldots\cdot\psi_N(\vec r_N)$$

$$\psi_1^{(0)}(r_1) = \sqrt{\frac{Z^3_{эфф}}{\pi a_Б}}\, e^{-\frac{Z_{эфф} r}{a_Б}}$$

$V^{(0)}(r_i)$ → решение $\left\{\begin{matrix}\psi_i^{(1)}(r_i) \\ \varepsilon_i^{(1)}\end{matrix}\right\}$

→ $V^{(1)}(r_i)$ → реш $\psi^{(2)}, \varepsilon^{(2)}$ → ...

n, l $_1H$ $1S$

$_3Li$ $(1S)^2$ → 2 электрона

$_6C$ $(1S)^2(2S)^2(2p)^2$

$g = 2(2l+1)$

$k \le g$; $C_g^k = \frac{g!}{k!(g-k)!}$

$_6C = 15$

$$\begin{cases}\langle \hat H\rangle = \int \psi^* H \psi\, dq = min \\ \int|\psi|^2 dq = 1\end{cases}$$

$$\int\delta\psi^*\hat H\psi\, dq + \int\psi^*\hat H\delta\psi\, dq = 0$$

$$\Rightarrow \int\delta\psi H^*\psi^* dq + \int\delta\psi^* H\psi\, dq = 0$$

$$\int\delta\psi^*\psi\, dq + \int\delta\psi\psi^* dq = 0 \quad *(-E)$$

Метод неопр. мн-ей Лагранжа

$$\int\delta\psi(H^*-E)\psi^* dq + \int\delta\psi^*(H-E)\psi\, dq = 0$$

$(H-E)\psi = 0$

$(H^*-E)\psi^* = 0$

$\psi(r_1, r_2) = \psi_1(r_1)\psi_2(r_2)$, $dq = d^3r_1 d^3r_2$

$\delta\psi^* = \delta\psi_1^*(r_1)\psi_2^*(r_2) + \psi_1^*(r_1)\delta\psi_2(r_2)$

структура Гамильтониана

$$\hat H = \sum_i \hat H(i) + \sum_{i<j}\frac{e^2}{|\vec r_i - \vec r_j|} =$$

$$= \hat H_{ц-с.п} + \hat V_{ост} + \hat V_{релят(LS)}$$

$$V_{ост} = \sum_i V_{ост}(r_i) = \sum_{i<j}\frac{e^2}{|\vec r_i - \vec r_j|} - V_{з.ц-с.п.}(r_i)$$

$\vec L = \vec l_1 + \vec l_2 + \ldots + \vec l_N$

$M = m_1 + m_2 + \ldots + m_N$

$\vec S = \vec s_1 + \vec s_2 + \ldots$

E(электрон. конфиг $^{2S+1}L_J$)

$(2p)^2$ $\begin{cases} L = l_1 + l_2 \\ l_1 = l_2 = 1\end{cases}$ $S = s_1 + s_2$, $s_1 = s_2 = 1/2$

$L = 0, 1, 2$ → ^1S, $^3P_{J=0,1,2}$, ^1D

$S = 0, 1$

A S

(15) $(1S)^2(2S)^2(2p)^2$ — ^1S (1), ^1D (5), ^3P (9)

$H_{ц-с.п} >> V_{ост}$

^3P 2, 1, 0

$V_{ост}$

Состояние электронов в атоме

$^{2S+1}L_J$

1) $(n\ell)^{k=2(2\ell+1)-g}$

$L = S = 0$

2) $(1s, n\ell)$

$L = \ell,\ S = 0, 1$

$J = \ell + S$

3) $(np)(n'p)$

$L = 0, 1, 2$, $S = 0, 1$ $^1S\ ^1P\ ^1D$

$S\ P\ D$

Правила ХУНДА

Наименьшей энергией обладает терм с наибольшим возможным при данной эл. конфигурации значении спина и наибольш. возможным значении спина.

Тонкая структура ат. уровней

$\langle JMLS | \sum_i (\ell_i S_i) \frac{\hbar^2}{2m^2c^2} \left(\frac{1}{r_i} \frac{dU(r_i)}{dr_i}\right) | J, M, LS\rangle$

$= \xi_{n\ell} \langle JMLS | \Sigma(\ell_i s_i) | JMLS \rangle =$

$= \xi_{n\ell} \langle JMLS | \ldots \rangle \langle \ldots | \Sigma(\ell_i s_i) | LM_L SM_S \rangle$

$\langle LM_L SM_S | JMLS \rangle$

$\vec{\ell}_i \sim \vec{L} \qquad \vec{s}_i \sim \vec{S}$

$\xi_{n\ell} \langle JMLS | (\vec{L}\vec{S}) | JMLS \rangle$

$= \xi_{n\ell} \, r_{LS} \frac{1}{2} (J(J+1) - L(L+1) - S(S+1))$

$J = L + S \ldots |L - S|$

$J_{осн} = |L - S| \to$ оболочка $< 1/2$

$J_{осн} = L + S \to$ оболочка $> 1/2$

Модель Атома Томаса – Ферми

$Z \gg 1$.

Оценки:

① $\ell_{внутр} \sim \frac{a_Б}{Z}$, $\ell_{внеш} \sim a_Б$

② $a_{хар}(Z) = ?$ $\quad 2 \sum^{n_{max}} n^2 \approx 2 n^3_{max} \sim Z$

$n_{хар} \sim Z^{1/3}$ $\qquad \lambda_{хар} \sim \frac{a_{хар}}{Z^{1/3}}$

③ $\frac{a_Б}{Z} \ll \frac{a_{хар}}{Z^{1/3}} \ll a_{хар} \ll a_Б$

④ $\begin{cases} E_{хар} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{Z^{2/3}}{a^2_{хар}} - \frac{Ze^2}{a_{хар}} \\ \boxed{a_{хар} = a_Б / Z^{1/3}} \end{cases}$

⑤ $p_{хар} \sim \hbar/\lambda_{хар} \sim \frac{\hbar}{a_Б} Z^{2/3}$

$\hbar \ell_{хар} \approx p_{хар} \cdot a_{хар} \sim Z^{1/3}$

$E^{tot}_{(ион)} \sim Z \cdot Z^{4/3} \sim Z \cdot Z^{4/3}$

$ \quad Т \qquad\qquad\quad U$

$E^{tot}_{ион} \approx 16 эВ \cdot Z^{7/3}$

Модель

$\oint p\,dx = 2\pi\hbar(n + 1/2)$

$\boxed{S/2\pi\hbar \sim n}$

$\frac{2 \cdot \frac{4}{3}\pi p^3_{max}\, dV}{(2\pi\hbar)^3} = dz(\vec{r})$

$\rho(\vec{r}) = p^3_{max} / 3\pi^2\hbar^3$

$\frac{p^2_{max}}{2m} - |e|\varphi(\vec{r}) = -\varepsilon_F^{(0)}$

$\rho(\vec{r}) = [2m(|e|\varphi(r) - \varepsilon_F)]^{3/2} / 3\pi^2\hbar^3$

$\begin{cases} \Delta\varphi = -4\pi(|e| Z \delta(\vec{r}) - |e|\rho(\vec{r})) \\ \varphi(r \to 0) \to \frac{|e|Z}{r} \\ r\varphi(r \to \infty) \to 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \varphi(r) = \frac{Z|e|}{r} \chi(r) \\ \chi(0) = 1 \\ \chi(r \to \infty) = 0 \end{cases}$

$\chi'' = \frac{\chi^{3/2}}{\sqrt{2}} \frac{8\sqrt{2}}{3\pi} \left(\frac{Z^{1/3}}{a_Б}\right)^{3/2}$

$r = x \frac{a_Б}{Z^{1/3}} \cdot b$, $b = \left(\frac{3\pi}{8\sqrt{2}}\right)^{2/3} \approx 0{,}8853$

$\boxed{\chi'' = \frac{\chi^{3/2}}{\sqrt{x}}}$

Атом в магнитном поле

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\sum_a \left(p_a + \frac{|e|}{c}\vec{A}(r_a)\right)^2 + U(ex, ee) + V_{es} + \frac{|e|\hbar}{mc}(\vec{H}\vec{S})$$

e^-

$$\vec{S} = \sum_a \vec{S}_a$$

$$\vec{A} = \frac{1}{2}[\vec{H}, \vec{r}], \quad \operatorname{div}\vec{A} = 0$$

$$[p_a, A(r_a)] = -i\hbar(\operatorname{div} A) \equiv 0$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{|e|}{mc}\sum_a(\vec{A}(\vec{r}_a)\vec{p}_a) + \frac{|e|^2}{2mc^2}\sum_a(\vec{A}(\vec{r}_a))^2 + \frac{e\hbar}{mc}(\vec{H}\cdot\vec{S})$$

$$= \hat{H}_0 + \frac{e}{2mc}\vec{H}\sum[\vec{r}_a\vec{p}_a] + \frac{|e|^2}{8mc^2}\sum_a[\vec{H}\vec{r}_a]^2 + \frac{|e|\hbar}{mc}(\vec{H}\cdot\vec{S})$$

$$= H_0 + \frac{|e|\hbar}{2mc}\left((\vec{L} + 2\vec{S}), \vec{H}\right) + \frac{|e|^2}{8mc^2}\sum_a[\vec{H}, \vec{r}_a]$$

$$\vec{H} = (0, 0, H)$$

$$\vec{\mu} = -\frac{\partial E_{\text{связ}}}{\partial \vec{H}} = \langle\psi| -\frac{\partial \hat{H}}{\partial \vec{H}}|\psi\rangle$$

$$\boxed{\hat{\vec{\mu}}_{AT} = -\mu_Б(\hat{\vec{L}} + 2\hat{\vec{S}})}$$

$\mu_Б H \ll V_{es}$

$$\Delta E = \langle JM_J LS|\mu_Б(\hat{L}_z + 2S_z)H|\ldots\rangle$$

$$= \langle JM_J LS|(J_z + S_z)\mu_Б H|\ldots\rangle$$

$$= \mu_Б H\left(M_J + M_J\frac{\langle JM_J LS|(SJ)|\ldots\rangle}{J(J+1)}\right)$$

$$\Delta E = \mu_Б H M_J g$$

$\to$ фактор Ланде

$$g = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}$$

$g = 1 \to$ Нормальный эфф. Зеемана.

$g \neq 1 \to$ Аномальный — // —

$$\boxed{L = S = 0}$$

$$\Delta E = \frac{|e|^2}{8mc^2}\sum_a[\vec{H}\vec{r}_a]^2 =$$

$$= \frac{|e|^2}{8mc^2}H^2\sum_a r_a^2\sin^2\theta_{ra}$$

$$\Delta E = \frac{|e|^2}{12mc^2}H^2\sum_a \vec{r}_a^{\,2} = -\frac{1}{2}\chi H^2$$

$\overline{\mu_z} = \chi H < 0 \to$ диамагнит. Атом в осн. сост.

$$\boxed{L = S \neq 0, \ J = 0}$$

$$\Delta E^{(2)} = \frac{\left|\langle J=1, M_J=0, L=1, S=1|\mu_Б\hat{S}_z H|J=0\ M_J=0\ L=1\ S=1\rangle\right|^2}{E^{(0)}_{J=0} - E^{(0)}_{J=1}}$$

$\Delta E < 0 \quad \overline{\mu_z(\text{осн})} > 0$

$V_H \gtrsim V_{es}$ Сильное магн. поле

$$\Delta E = \langle LM_L SM_S|\mu_Б H(L_z + 2S_z) + A(\vec{L}\vec{S}) =$$

$$= \mu_Б H(M_L + 2M_S) + A\, M_L \cdot M_S$$

Эффект Пашена–Бака

Влияние структуры ядра на электр. уровни

Ze $\quad Z_p, N_n$

$A = Z + N$

$$V_{es} = V_{м.е} = -\vec{\mu}_e \vec{H}_{рел} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{(2\mu_Б \vec{S} \cdot \mu_Б \vec{\ell})}{2 z^3} = \frac{\vec{\mu}_s \cdot \vec{\mu}_e}{2 z^3} \sim \alpha^3 Ry$$

$$V_{es} = A_{es} (\hat{\vec{L}} \hat{\vec{S}})$$

$$\hat{V}_{c.m} = V_{iJ} = A_{iJ} (\vec{i} \vec{J}) \sim \frac{\mu_Я \mu_e}{a_Б^3} \sim \frac{m_e}{M_p} V_{es}$$

---

11. §120 §121

(+) изотопическое смещение

11. §120

Двухатомные молекулы

$$\Delta P \sim \frac{\hbar}{a} \qquad \varepsilon_{эл} \sim \frac{(\Delta p)^2}{m} \sim \frac{\hbar^2}{ma^2}$$

$$\varepsilon_{кол} \sim \hbar\omega \sim \sqrt{\frac{m}{M}}\,\varepsilon_{эл} \quad \sim 0{,}01$$

$$\varepsilon_{пис} \sim M_я \omega^2 a^2 \sim \varepsilon_{эл}$$

$$\varepsilon_{вр} \sim \frac{\hbar^2}{I_я} \sim \frac{\hbar^2}{M_я a^2} \sim \frac{m}{M_я}\varepsilon_{эл}$$

$$\varepsilon_{эл} : \varepsilon_{кол} : \varepsilon_{вр} \sim 1 : \sqrt{\frac{m}{M}} : \frac{m}{M}$$

$$b = \sqrt{\hbar/M\omega} \sim \left(\frac{m}{M}\right)^{1/4} a$$

$$\frac{T_{кол}}{T_{эл}} = \frac{\hbar\omega_{эл}}{\hbar\omega_{кол}} \sim \sqrt{\frac{M}{m}}, \quad \frac{T_{вр}}{T_{эл}} \sim \frac{M}{m}$$

1 поворот : 100 колебаний : 10000 вращ. e^- вокруг ядра

Адиабат. приближение

$$\hat H = \hat T_{яд} + \hat T_{эл} + U(R, r)$$

$$\hat H_0 = \hat T_{эл} + U(R, r)$$

$$\hat H_0 \varphi_n(R, r) = \varepsilon_n(R)\varphi_n(R, r)$$

$$\Phi(R, r) = \sum_n \Phi_n(R)\varphi_n(R, r)$$

$$\int \varphi_n (\hat T_{яд} + \hat H_0)\Phi = \varepsilon \Phi$$

$$\left(\hat T_{яд} + \varepsilon_m - \varepsilon\right)\Phi_m = \cancel{\sum_n \Lambda_{mn}\Phi_n(R)} \to 0$$

$$\sim \frac{m}{M}, \left(\frac{m}{M}\right)^{3/4}$$

$$(\hat T_{яд} + \varepsilon_m)\Phi_{m\nu} = \varepsilon_{m\nu}\Phi_{m\nu}$$

$$\varepsilon_m = U_m$$

H_2

$$\hat H = \frac{\vec p_1^{\,2}}{2m} + \frac{\vec p_2^{\,2}}{2m} - \frac{e^2}{r_{a1}} - \frac{e^2}{r_{b1}} + \frac{e^2}{r_{12}} + \frac{e^2}{R} - \frac{e^2}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b1}}$$

$$\Psi_1 = \varphi_a(r_{a1})\varphi_b(r_{b2})$$

$$\Psi_2 = \varphi_a(r_{a2})\varphi_b(r_{b1})$$

$$\varphi_{S;A} = \frac{\Psi_1 \pm \Psi_2}{\sqrt{2(1 \pm \beta^2)}} \longrightarrow \begin{matrix} S = 0 \\ S = 1 \end{matrix}$$

$$\beta = \int \varphi_a(r_{1a})\varphi_b(r_{1b})\,d^3 r_{1a}$$

$$2\varepsilon_{1s} + \frac{Q \pm A}{(1 \pm \beta^2)}$$

$$|Q| \ll |A|, \quad A < 0$$

Нестац. теория возмущений

$\hat H = \hat H_0 + \hat V(\vec r, t)$, $\Psi_n^{(0)} = \varphi_n^{(0)}(\vec r, t) = \psi_n(\vec r) e^{-i\omega_n t}$

$\omega_n^{(n)} = \varepsilon_n^{(0)}/\hbar$, $\Psi = \sum a_k \psi_k^{(0)}$

$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (\hat H_0 + \hat V)\Psi$, $\Psi = \sum_k a_k(t) \psi_k^{(0)}$

$i\hbar \frac{\partial \psi_n^{(0)}}{\partial t} = \hat H_0 \psi_n^{(0)}$

$\int \psi_m^* \Big| \; i\hbar \sum_k \frac{d a_k(t)}{dt} \psi_k^{(0)} = \sum_k a_k(t) \hat V \psi_k^{(0)}$

$$i\hbar \frac{d a_m(t)}{dt} = \sum_k \int \psi_m^{(0)*}(\vec r) V(\vec r, t) \psi_k^{(0)}(\vec r) d^3 r \cdot e^{i(\omega_m^{(0)} - \omega_k^{(0)})t} a_k(t) =$$

$$\cancel{a_k(t)} = \sum_k V_{mk}(t) e^{i\omega_{mk} t} a_k(t)$$

$\psi_n^{(0)}$, $a_n^{(0)} = 1$, $a_k^{(0)} = 0$ при $k \neq n$,

$a_k(t) = a_k^{(0)} + a_k^{(1)}(t) + \dots$

$$i\hbar \frac{d a_k^{(1)}}{dt} = V_{kn}(t) e^{i\omega_{kn} t}$$

$$a_k^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int V_{kn}(t) e^{i\omega_{kn} t'} dt'$$

$$\boxed{a_{kn}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int V_{kn}(t) e^{i\omega_{kn} t} dt}$$

$\Psi_n = \sum_k a_k(t) \psi_k^{(0)}$

$$\int |\Psi_n|^2 d^3 r = 1 = \sum_k |a_{kn}|^2 = |a_{nn}|^2 + \sum_{k \neq n} |a_{kn}|^2 = W_{nn} + \sum_{k \neq n} W_{kn}$$

$$\boxed{W_{nn} = 1 - \sum_{k \neq n} W_{kn}}$$

$V(\vec r, t)\big|_{t \to \pm\infty} \to 0$

$\Psi = \sum_k a_{kn}(\infty) \psi_k^{(0)} \to \neq \psi_n^{(0)}$

$$W_{fi} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} V_{fi}(t) e^{i\omega_{fi} t} dt \right|^2 \ll 1$$

1) $\frac{\overline{V_{fi}}}{\hbar \omega_{fi}} \ll 1$ 2) $\tau_{хар} \omega_{fi} \gg 1$

$V(x, t) = -eX\mathcal{E}\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\pi}\operatorname{arctg}\frac{t}{\tau}\right)$

$V_{nn} = 0$

$$a_{mn}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t} V_{mn} e^{i\omega_{mn} t} dt = -\frac{V_{mn}(t)}{\hbar\omega_{mn}} + \frac{1}{\hbar\omega_{mn}} \int_{-\infty}^{t} \frac{\partial V_{mn}(t)}{\partial t} e^{i\omega_{mn} t} dt$$

$(a_{nn}^{(1)} = 0)$

$$\Psi_n(t) = \left(\psi_n^{(0)}(\vec r) + \sum_{m \neq n} \frac{V_{mn}(t)}{\varepsilon_n^{(0)} - \varepsilon_m^{(0)}} \psi_m^{(0)}(\vec r)\right) e^{-i\omega_n t} + \sum_{m \neq n} \left(\frac{1}{\hbar\omega_{mn}} \int_{-\infty}^{t} \frac{\partial V_{mn}(t)}{\partial t} e^{i\omega_{mn} t} dt\right) \psi_m^{(0)}$$

$$W_{fi} = \frac{1}{\hbar^2 \omega_{fi}^2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial V_{mn}}{\partial t} e^{i\omega_{mn} t} dt \right|^2$$

$$\to W_{fi} = \frac{|V_{fi}(\infty)|^2}{\hbar^2 \omega_{fi}^2} \ll 1$$

$V_{fi}(t)$	$\overline{V_{fi}} \ll \hbar\omega_{fi}$	$\overline{V_{fi}} \gg \hbar\omega_{fi}$
$\tau_{хар}\omega_{fi} \gg 1$	Т.В. + +	Т.В. +
$\tau_{хар}\omega_{fi} \ll 1$	Т.В. +	∃ точное решение

Задачи

№1. Найти гл. поправки к трем нижним уровням энергии двумерного осциллятора, обусловленные наличием в его потенц. энергии слабой нелин и слабого отклонения частот по x и y от соотношения 2:1

$$U(x,y) = \frac{m\omega^2}{2}\left[(4+\varepsilon)x^2 + y^2\right] + \alpha x y^2$$

$$\hat{H}(x,y) = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + \frac{m(2\omega)^2 x^2}{2} + \frac{m\omega^2 y^2}{2} + \varepsilon \frac{m\omega^2}{2} x^2 + \alpha x y^2$$

т.е. $V = \varepsilon \frac{m\omega^2}{2} x^2 + \alpha x y^2$

$$E_{n_x n_y} = \hbar\omega\left(2n_x + n_y + \frac{3}{2}\right)$$

* $x = \frac{a_x + a_x^+}{\sqrt{2}} x_0,\quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}},\quad p_{x_0} = \sqrt{2m\omega\hbar}$

$y = \frac{a_y + a_y^+}{\sqrt{2}} y_0,\quad y_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}},\quad p_{y_0} = \sqrt{m\omega\hbar}$

** $(a^+)_{mn} = \sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+1}$

$(a)_{mn} = \sqrt{n}\,\delta_{m,n-1}$

*** Три нижних уровня:

(1,0) —— —— (0,2)

(0,1) ——

(0,0) ——

Поправка $E^{(1)} = V_{nn}$

1) $n_x = 0,\ n_y = 0$:

$$E^{(1)} = \langle 0,0|\, \varepsilon \frac{\hbar\omega^2}{2}\frac{x_0^2}{2}(a_x + a_x^+)^2 \,|0,0\rangle =$$

$$= \frac{\varepsilon\hbar\omega^2}{8}\langle 0,0|\, a_x a_x^+ \,|0,0\rangle = \frac{\varepsilon\hbar\omega}{8}$$

$$E^{(2)} = \sum{}' \frac{|V_{nm}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \left(\frac{\alpha x_0 y_0^2}{2\sqrt{2}}\right)^2 \cdot$$

$$\cdot\left(\frac{1}{\frac{3}{2}\hbar\omega - \frac{7}{2}\hbar\omega} + \frac{1}{\frac{3}{2}\hbar\omega - \frac{11}{2}\hbar\omega}\right) =$$

$$= -\frac{\alpha^2 x_0^2 y_0^4}{\hbar\omega\, 8} = -\frac{\alpha^2\hbar^2}{m^3\omega^4}\cdot\frac{2}{8}$$

т.к. $\langle n_x n_y|(a_x + a_x^+)(a_y a_y^+ + a_y^+ a_y^+)|0,0\rangle =$

$= \delta_{n_x,1}\delta_{0,n_y} + \delta_{n_x,1}\delta_{n_y,2}\cdot\sqrt{2}$

$\Rightarrow\ n_x = 1\ \ n_y = 0$

$\quad\ \ n_x = 1\ \ n_y = 2$

$$\Rightarrow E = \frac{3}{2}\hbar\omega + \frac{\varepsilon}{8}\hbar\omega - \frac{1}{4}\frac{\alpha^2\hbar^2}{m^3\omega^4}$$

$n_x = 0,\ n_y = 1$

$E^{(1)} = \frac{\varepsilon}{8}\hbar\omega$

$\langle n_x n_y|\, \alpha\frac{x_0 y_0^2}{2\sqrt{2}} a_x^+ (a_y a_y^+ + a_y^+ a_y + a_y^+ a_y^+)\,|0,1\rangle$

$= \frac{\alpha x_0 y_0^2}{2\sqrt{2}}\delta_{n_x,1}\left(\sqrt{6}\,\delta_{n_y,3} + \delta_{n_y,1} + 2\delta_{n_y,1}\right)$

$$\Rightarrow E^{(2)} = -\frac{\alpha^2 x_0^2 y_0^4}{8\hbar\omega}\left(\frac{9}{2} + \frac{6}{4}\right)$$

$$\Rightarrow E = \frac{5}{2}\hbar\omega + \frac{\varepsilon}{8}\hbar\omega - \frac{3}{8}\frac{\alpha^2\hbar^2}{m^3\omega^4}$$

вырождение $\begin{matrix} n_x = 1 \\ n_y = 0 \end{matrix}$ $\begin{matrix} n_x = 0 \\ n_y = 2 \end{matrix}$

$$V_{11} = \langle 1,0 | \varepsilon \frac{m\omega^2}{2\cdot 2} x_0^2 (a_x a_x^+ + a_x^+ a_x + \cancel{a_x^+ a_x^+}) + \cancel{\frac{\alpha x_0 y_0^2}{\alpha\sqrt{2}} (a_x + a_x^+)(a_y + a_y^+)^2} | 1, 0 \rangle$$

$$\Rightarrow V_{11} = \frac{3}{8} \varepsilon \hbar\omega$$

$$V_{22} = \langle 0,2 | \frac{\varepsilon m\omega^2 x_0^2}{4} a_x a_x^+ | 0, 2 \rangle =$$

$$\Rightarrow V_{22} = \frac{1}{8} \varepsilon \hbar\omega$$

$$V_{12} = V_{21} = \langle 1,0 | 0 + \alpha a_x^+ \frac{x_0 y_0^2}{\alpha\sqrt{2}} a_y a_y | 0,2 \rangle$$

$$V_{12} = V_{21} = \frac{\alpha}{2} x_0 y_0^2$$

Секулярное уравнение

$$|V - \lambda E| = 0$$

$$\Rightarrow E^{(1)}_{1,2} = \lambda_{1,2} = \frac{\varepsilon\hbar\omega}{4} \pm \frac{1}{2} \frac{\varepsilon\hbar\omega}{4} \sqrt{1 + \frac{\alpha^2\hbar}{\varepsilon^2 m^3 \omega^5}}$$

$$\alpha^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^3 \ll \varepsilon^2 \hbar^2 \omega^2 \Rightarrow$$ разложение корня

$$\Rightarrow E^{(1)}_{1,2} \simeq \frac{3}{8} \varepsilon \hbar\omega, \ \frac{1}{8} \varepsilon\hbar\omega$$

$$U(x,y) = \frac{m\omega^2}{2} ((4+\varepsilon) x^2 + y^2)$$

$$\omega_y = \omega$$

$$\omega_x \approx 2\omega\left(1 + \frac{\varepsilon}{8}\right)$$

$$E_y = \hbar\omega\left(n_y + \frac{1}{2}\right)$$

$$E_x = \hbar 2\omega\left(1 + \frac{\varepsilon}{8}\right)\left(n_x + \frac{1}{2}\right)$$

$$\Rightarrow E = \hbar\omega\Big(2n_x + n_y + 1 + \frac{1}{2} + n_x \frac{\varepsilon}{4} + \frac{\varepsilon}{8}\Big)$$

$\begin{matrix} n_x = 1 \\ n_y = 0 \end{matrix}$ $\quad E_{1,0} = \frac{7}{2}\hbar\omega + \frac{3}{8}\varepsilon\hbar\omega$

$\begin{matrix} n_x = 0 \\ n_y = 2 \end{matrix}$ $\quad E_{02} = \frac{7}{2}\hbar\omega + \frac{1}{8}\varepsilon\hbar\omega.$

№2 Нейтральная частица $s=\frac12$ и гиромагнитн. соотн. g, помещена в поле $\vec B = B\vec e_z$.

$\hat H = -g\hat S_z B$. В начальный момент времени частица поляризована в направлении $\vec n$.

• Показать, что изменение $\langle \vec S\rangle$ отвечает кл. картине прецессии.

Из лекций: $\chi(\sigma,t) = \begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\, e^{-\frac{i\omega t}{2}} \\ \sin\frac{\theta}{2}\, e^{+\frac{i\omega t}{2}}\end{pmatrix}$

где $\omega = \frac{2|\varepsilon_s^{\pm}|}{\hbar} = \frac{|e|B}{mc} = \frac{gB}{\hbar}$

частота прецессии

Покажем изменение $\langle \vec S\rangle$

$$\langle \hat{\vec S}(t)\rangle = \frac12 \chi^+(t)\,\vec\sigma\,\chi(t), \quad S_i = \frac12\sigma_i$$

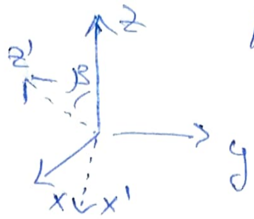
$$\langle S_x\rangle = \frac12\begin{pmatrix}\cos\theta/2\; e^{-\frac{i\omega t}{2}} \\ \sin\theta/2\; e^{+\frac{i\omega t}{2}}\end{pmatrix}^+\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}(\ldots)$$

$$\langle S_x\rangle = \frac12\sin\theta\cos\omega t$$

$$\langle S_y\rangle = \frac12\sin\theta\sin\omega t$$

$$\langle S_z\rangle = \frac12\cos\theta$$

№3 Ядро с $S=1$ н-ся в состоянии $S_z=+1$. Найти вероятности проекций $+1, 0, -1$ на ось z' под угл. β в пл-ти xz.



$$\hat R_y = e^{-iS_y\beta} = \cos\frac\beta2 - i\sigma_y\sin\frac\beta2$$

$$\hat R_y = \begin{pmatrix}\cos\beta/2 & -\sin\beta/2\\ \sin\beta/2 & \cos\beta/2\end{pmatrix}$$

Представим данную систему как две подсистемы с $S=\frac12$.

$$\Rightarrow |1,1\rangle' = |\tfrac12\rangle'_1|\tfrac12\rangle'_2$$

$$|1,-1\rangle' = |-\tfrac12\rangle'_1|-\tfrac12\rangle'_2$$

$$|1,0\rangle' = \frac{1}{\sqrt2}|\tfrac12\rangle'_1|-\tfrac12\rangle'_2 + \frac{1}{\sqrt2}|-\tfrac12\rangle'_1|\tfrac12\rangle'_2$$

$$\Rightarrow \hat R_y|1,1\rangle = |1,1\rangle' = |\tfrac12\rangle'_1|\tfrac12\rangle'_2$$

$$\hat R_y|\tfrac12\rangle = \begin{pmatrix}\cos\beta/2 & -\sin\beta/2\\ \sin\beta/2 & \cos\beta/2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \cos\tfrac{\beta}{2}|\tfrac12\rangle + \sin\tfrac\beta2|-\tfrac12\rangle$$

$$\Rightarrow |1,1\rangle' = |\tfrac12\rangle'_1|\tfrac12\rangle'_2 =$$

$$= \cos^2\tfrac\beta2|\tfrac12\rangle_1|\tfrac12\rangle_2 + \sin\tfrac\beta2\cos\tfrac\beta2|\tfrac12\rangle_1|-\tfrac12\rangle_2 + \sin\tfrac\beta2\cos\tfrac\beta2|-\tfrac12\rangle_1|\tfrac12\rangle_2 + \sin^2\tfrac\beta2|-\tfrac12\rangle_1|-\tfrac12\rangle_2$$

$$\Rightarrow w_{+1} = |\langle 1,1||1,1\rangle'|^2 = |{}_1\langle\tfrac12|{}_2\langle\tfrac12||\tfrac12\rangle'_1|\tfrac12\rangle'_2|^2$$

$$\Rightarrow w_{+1} = \cos^4\tfrac\beta2$$

$$w_{-1} = \sin^4\tfrac\beta2$$

$$w_0 = 2\sin^2\tfrac\beta2\cos^2\tfrac\beta2$$

и $\sum w_i = 1$.

№ 4

Построить в.ф., возникающ. при сложении моментов $j_1 = 1$, $j_2 = 2$

$\langle \hat{j}_1 \rangle$ — ? если $J = 3$, $J_z = -1$.

из лекции

$$J_-|J,m\rangle = \sqrt{(J+m)(J-m+1)}\,|J,m-1\rangle$$

$$J_+|J,m\rangle = \sqrt{(J-m)(J+m+1)}\,|J,m+1\rangle$$

* $|3,3\rangle = \underset{j_1}{|1,1\rangle}\underset{j_2}{|2,2\rangle}$ полный момент

Если подействовать J_- или J_+:

$$J_-|J,m\rangle = \hat{j}_{1-} + \hat{j}_{2-}$$

$$J_-|3,3\rangle = \sqrt{6}\,|3,2\rangle$$

$$J_-|1,1\rangle|2,2\rangle = \sqrt{2}\,|1,0\rangle|2,2\rangle + 2|1,1\rangle|2,1\rangle$$

* $|3,2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|1,0\rangle|2,2\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|1,1\rangle|2,1\rangle$

$$J_-|3,2\rangle = (\hat{j}_{1-} + \hat{j}_{2-})\left(\sqrt{\tfrac{2}{3}}|1,1\rangle|2,1\rangle + \tfrac{1}{\sqrt{3}}|1,0\rangle|2,2\rangle\right) =$$

$$= \sqrt{\tfrac{4}{3}}|1,0\rangle|2,1\rangle + \sqrt{\tfrac{12}{3}}|1,1\rangle|2,0\rangle + \sqrt{\tfrac{4}{3}}|1,0\rangle|2,1\rangle + \sqrt{\tfrac{2}{3}}|1,-1\rangle|2,2\rangle$$

* $|3,1\rangle = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{15}}|1,0\rangle|2,1\rangle + \sqrt{\frac{2}{5}}|1,1\rangle|2,0\rangle + \frac{1}{\sqrt{15}}|1,-1\rangle|2,2\rangle$

* $|3,-3\rangle = |1,-1\rangle|2,-2\rangle$

* $|3,-2\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}|1,0\rangle|2,-2\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|1,-1\rangle|2,-1\rangle$

* $|3,-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{15}}|1,1\rangle|2,-2\rangle + \sqrt{\frac{2}{5}}|1,-1\rangle|2,0\rangle + \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{15}}|1,0\rangle|2,-1\rangle$

$$J_+|3,-1\rangle = \sqrt{12}\,|3,0\rangle \;\{$$

$$J_+|3,-1\rangle = \sqrt{\tfrac{12}{5}}|1,-1\rangle|2,1\rangle + \ldots$$

* $|3,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}|1,-1\rangle|2,1\rangle + \frac{\sqrt{3}}{5}|1,0\rangle|2,0\rangle + \frac{1}{\sqrt{5}}|1,1\rangle|2,-1\rangle$

Задачи

$$|2,2\rangle = \alpha|1,0\rangle|2,2\rangle + \beta|1,1\rangle|2,1\rangle$$

$$\begin{cases} \alpha + \beta\sqrt{2} = 0 \\ \alpha^2 + \beta^2 = 1 \end{cases} \qquad \beta = -\frac{1}{\sqrt{3}}, \quad \alpha = \sqrt{\tfrac{2}{3}}$$

* $|2,2\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|1,0\rangle|2,2\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}|1,1\rangle|2,1\rangle$

* $|2,1\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}|1,1\rangle|2,0\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|1,0\rangle|2,1\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|1,-1\rangle|2,2\rangle$

* $|2,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1,-1\rangle|2,1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1,1\rangle|2,-1\rangle$

* $|1,0\rangle = \sqrt{\frac{3}{10}}|1,-1\rangle|2,1\rangle - \sqrt{\frac{2}{5}}|1,0\rangle|2,0\rangle + \sqrt{\frac{3}{10}}|1,1\rangle|2,-1\rangle$

* $|1,1\rangle = \sqrt{\frac{3}{5}}|1,-1\rangle|2,2\rangle - \sqrt{\frac{3}{10}}|1,0\rangle|2,1\rangle + \sqrt{\frac{1}{10}}|1,1\rangle|2,0\rangle$

* $|1,-1\rangle = -\sqrt{\frac{3}{5}}|1,1\rangle|2,-2\rangle + \sqrt{\frac{3}{10}}|1,0\rangle|2-$ $+\sqrt{\frac{1}{10}}|1,-1\rangle|2,0\rangle$

$$\langle \hat{j}_1 \rangle = \frac{\langle J \rangle}{J(J+1)} \langle |\vec{j}_1, \vec{J}| \rangle = -\frac{1}{3 \cdot 4}\left(0, 0, \frac{3(3+1) - 2(2+1) + 2}{2}\right.$$

$$\langle \hat{j}_1 \rangle = \left(0, 0, -\tfrac{1}{3}\right)$$

$$\langle \hat{j}_2 \rangle = \left(0, 0, -\tfrac{2}{3}\right)$$

$$\langle 3,-1|\hat{j}_1|3,-1\rangle = -\frac{1}{3}$$

$$\langle 3,-1|\hat{j}_2|3,-1\rangle = -\frac{2}{3}$$

$J = 3 \quad J_z = -1.$

Задачи

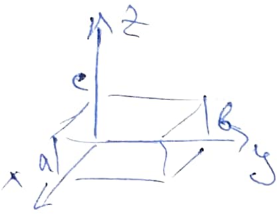
№5 Две частицы, взаимод. по закону $U = g\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ заключены в паралл.-пед с ребрами a, b, c.

Найти поправку первого порядка к энергии основного и первого возбужденного сост. системы:

а) различные

б) тождеств. $s = 0$

в) тождеств. $s = 1/2$



$$V = g\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

$$U(r) = \begin{cases} 0, \dots \\ \infty, \dots \end{cases}$$

$$\psi(r) = A \sin\frac{\pi n_x x}{a} \sin\frac{\pi n_y y}{b} \cdot \sin\frac{\pi n_z z}{b}$$

Отнормируем:

$$1 = \int |\psi_1|^2 dx\,dy\,dz = A^2 \int \sin^2 \int \sin^2 \cdot$$

$$\int \frac{dz}{2} - \frac{\cos}{2}\, dz$$

$$\Rightarrow A = \sqrt{\frac{8}{abc}}$$

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2}\right)$$

а) Для 2х различных частиц

$\psi = \psi_1 \psi_2$, пусть $a < b < c$

тогда: $(n_{1x}, n_{1y}, n_{1z}) = (1, 1, 1)$, $(n_{2x}, n_{2y}, n_{2z}) = (1, 1, 1)$ } осн. состоя.

и $n_{1z} = 2$ или $n_{2z} = 2$ } первое возбужд.

$$E_1^{(1)} = \langle \psi_1^0 | V | \psi_1^0 \rangle = \left(\frac{8}{abc}\right)^2 g \int \dots \int \delta(x_1 - x_2)\delta(y_1 - y_2)\delta(z_1 - z_2) \sin^2\frac{\pi x_1}{a} \dots \sin^2\frac{\pi x_2}{a}\, dx_1 dy_1 dz_1\, dx_2 dy_2 dz_2 = \frac{27g}{8abc}$$

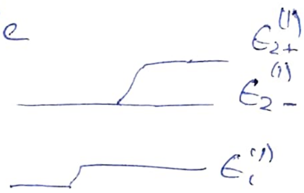
Секулярное ур-е:

$$|V - E_2^{(1)}\delta| = 0$$

$$V_{11} = V_{22} = \left(\frac{8}{abc}\right)^2 \int \sin^4\frac{\pi x_1}{a} \sin^4\frac{\pi y_1}{b} \left(\sin\frac{\pi z_1}{c} \sin\frac{2\pi z_1}{c}\right)^2 = \left(\frac{8}{abc}\right)^2 g \cdot \frac{9}{64} ab \frac{1}{4} c = \frac{9g}{4abc}$$

$$V_{12} = V_{21} = V_{22} = \frac{9g}{4abc}$$

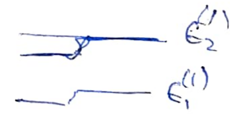
$$\Rightarrow E_2^{(1)} = \begin{cases} \frac{9g}{2abc} \\ 0 \end{cases}$$



б) $S_1 = S_2 = 0 \Rightarrow \psi_{111111} \to$ симм. по перестановк.

$$\psi_2 = \frac{\psi_{112}^{(1)} \psi_{111}^{(2)} + \psi_{111}^{(1)} \psi_{112}^{(2)}}{\sqrt{2}}$$

E_2 не вырожд.



$$E_1^{(1)} = \frac{27g}{8abc}$$

$$E_2^{(1)} = \langle \psi_2 | V | \psi_2 \rangle = \frac{9g}{2abc}$$

в) $S_1 = S_2 = \frac{1}{2}$

$$\varphi = \psi(\vec{r})\chi(s)$$

$$\psi_\pm(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{\psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) \pm \psi_1(\vec{r}_2)\psi_2(\vec{r}_1)}{\sqrt{2}}$$

$$\chi_\mp(s_{z_1}, s_{z_2}) = \frac{\chi_1(s_{z_1})\chi_2(s_{z_2}) \mp \chi_1(s_{z_2})\chi_2(s_{z_1})}{\sqrt{2}}$$

Задачи

При ε_1: $\Psi_1=\Psi_2 \Rightarrow \Psi=\Psi_+ \chi_-$

$(\text{т.к. } \Psi_-=0) \Rightarrow \varepsilon_1^{(1)}=\frac{22g}{8abc}$

При ε_2: $\Psi=\frac{\Psi_{02}^{(1)}\varphi_{111}^{(2)}+\Psi_{11}^{(1)}\Psi_{112}^{(2)}}{\sqrt{2}}\cdot\frac{|\uparrow\downarrow\rangle-|\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$

$S=0$

$\langle\Psi_{S=0}|V|\Psi_{S=0}\rangle=\frac{9g}{2abc}$

$$\Psi=\frac{\Psi_{112}^{(1)}\Psi_{111}^{(2)}-\Psi_{111}^{(1)}\Psi_{112}^{(2)}}{\sqrt{2}}\left\{\begin{array}{l}|\uparrow\uparrow\rangle\\ \frac{|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}\\ |\downarrow\downarrow\rangle\end{array}\right.\quad S=1$$

$\langle\Psi_{S=1}|V|\Psi_{S=1}\rangle=0$

$S=0$ ε_{20}

$S=1$ ε_{21}

ε_1

№6 Определить кв. числа осн. терм C, N, O, F, Ne, Fe. Для атома кислорода в осн. сост. найти его эф. магн. момент. Парамагн. или диамагн. св-ва у атомов C и Ne в осн. сост.?

Для опр-я терма нужно знать эл. конфиг.-цию. $^{2S+1}L_J$ — мультиплетность, J — момент

$_6C = 1s^2 2s^2 2p^2$ — номер уровня, орбиталь, кол-во e^-, орбит. момент

L	S	P	D	F
	0	1	2	3

Воспользуемся правилами Хунда (лекции):

m_l: $+1$, 0, -1

$_6C$ $\boxed{\uparrow|\uparrow|\ }$ $\Rightarrow L=1 \quad S=1$

Уровень заполненности $2<6/2$

$\Rightarrow J=|L-S|=0$

$\Rightarrow {}^3P_0$

$_6C$ $1s^2 2s^2 2p^2$ $\boxed{\uparrow|\uparrow|\ }$ $S=1$ $l=1$ ${}^3P_0$

$_7N$ $1s^2 2s^2 2p^3$ $\boxed{\uparrow|\uparrow|\uparrow}$ $S=3/2$ $l=0$ ${}^4S_{3/2}$

$_8O$ $1s^2 2s^2 2p^4$ $\boxed{\uparrow\downarrow|\uparrow|\uparrow}$ $S=1$ $l=1$ ${}^3P_2$

$_9F$ $1s^2 2s^2 2p^5$ $\boxed{\uparrow\downarrow|\uparrow\downarrow|\uparrow}$ $S=\frac{1}{2}$ $l=1$ ${}^2P_{3/2}$

$_{10}Ne$ $1s^2 2s^2 2p^6$ $\boxed{\uparrow\downarrow|\uparrow\downarrow|\uparrow\downarrow}$ $S=0$ $l=0$ ${}^1S_0$

$_{26}Fe$ $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^6$ $\boxed{\uparrow\downarrow|\uparrow|\uparrow|\uparrow|\uparrow}$ $S=2$ $l=2$ ${}^5D_4$

Из лекций $\hat{\vec{\mu}}=-\mu_Б(\hat{\vec{l}}+2\hat{\vec{S}})$

$\langle\hat{\mu}\rangle=-\mu_Б(\langle\hat{J}\rangle+\langle\hat{S}\rangle)=$

$=-\mu_Б\langle\hat{J}\rangle\left(1+\frac{\langle\hat{S}\hat{J}\rangle}{J(J+1)}\right)=$

$=-\mu_Б\langle J\rangle\left\{1+\frac{1}{2}\frac{J(J+1)+S(S+1)-l(l+1)}{J(J+1)}\right.$

O: $\langle\mu\rangle=-3\mu_Б$

Для C и Ne $\langle J\rangle=0$

~~Воспользуемся ф-лой Ланжевена~~

$\cancel{\mathcal{H}=\frac{e^2}{8mc}H^2\langle\sum r_i^2\sin^2\theta_i\rangle=-\frac{1}{2}\chi H^2}$

C: $S=1=l$, $J=0$ из лекций: Парамагнетик

Ne: $S=0=l$, Диамагнетик.

Задачи

№7 Как выглядит зеемановское расщ. уровней атома водорода с $n=2$ в слабом и сильном магн. поле?

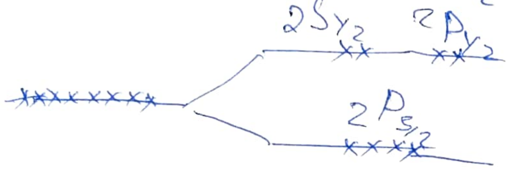
1) $\mu_B B \ll E_{2p_{3/2}} - E_{2p_{1/2}} = \alpha^2 \frac{Ry}{16}$

2) $\mu_B B \gg E_{2p_{3/2}} - E_{2p_{1/2}} = \alpha^2 \frac{Ry}{16}$

1) Учитыв. тонкое расщепление $\Rightarrow$ снимается вырождение по J

$n = n_r + l + 1$

$^{2S+1}L_J$

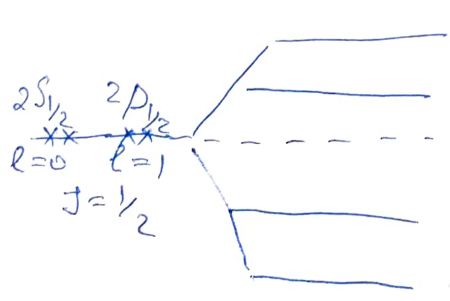


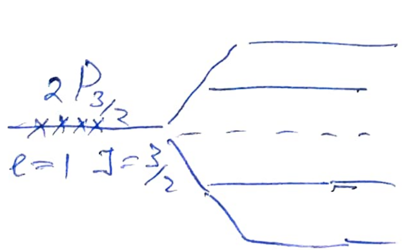
Для зеемановского расщепления (лекции)

$$\Delta E = \mu_B m_J B g, \quad g = \left(1 + \frac{1}{2}\frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{J(J+1)}\right)$$

$\Rightarrow$

	$^2S_{1/2}$		$^2P_{1/2}$		$^2P_{3/2}$			
J_z	$1/2$	$-1/2$	$1/2$	$-1/2$	$-3/2$	$-1/2$	$1/2$	$3/2$
$\frac{\Delta E}{\mu_B B}$	1	-1	$1/3$	$-1/3$	-2	$-2/3$	$2/3$	2

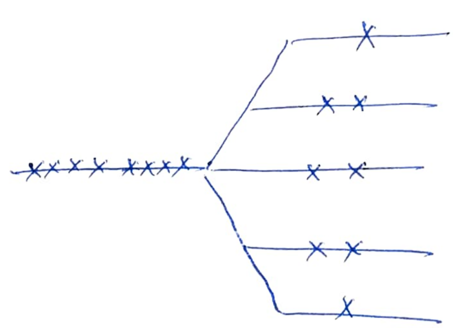




2) Тонкого расщепления нет для эффекта Пашена-Бака

$$\Delta E = \mu_B B (l_z + 2S_z)$$

l	l_z	S_z	$\Delta E/\mu_B B$	вырождение
0	0	$1/2$	1	2^x вырожд.
1	0	$1/2$	1	
0	0	$-1/2$	-1	2^x
1	0	$-1/2$	-1	
1	1	$-1/2$	0	2^x
1	-1	$1/2$	0	
1	-1	$-1/2$	-2	1^o
1	1	$1/2$	2	1^o



Задача 44

№8 Для описания относит. движения ядер в 2х атомн. молек. можно использовать:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m_N} - 2Ze^2\left(\frac{1}{r} - \frac{a}{2r^2}\right)$$

• Найти энергии св. состояний при $n_r \ll 1/\xi$, $l \ll 1/\xi$, $\xi = \frac{m_e}{m_N}$

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} - 2Ze^2\left(\frac{1}{r} - \frac{a}{2r^2}\right)$$

$$U_{эфф} = -\frac{2Ze^2}{r} + \frac{Ze^2 a}{r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} =$$

$$= -\frac{g^2}{r} + \frac{\hbar^2}{2mr^2}\xi(\xi+1)$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar^2}{2mr^2}\left(\frac{Ze^2 a\, 2m}{\hbar^2} + l(l+1)\right) =$$

$$= \frac{\hbar^2}{2mr^2}\xi(\xi+1)$$

$$\Rightarrow \xi^2 + \xi - \frac{2Zmae^2}{\hbar^2} - l(l+1) = 0$$

$$\xi = \frac{-1 \pm \sqrt{1 + 4\left(\frac{2Zm a}{m_e} + l(l+1)\right)}}{2} = -\frac{1}{2} + \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} + \frac{1}{2\sqrt{\varepsilon}} + 2\sqrt{\varepsilon}\cdot l(l+1)$$

$$a = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \qquad \varepsilon = \frac{m_e}{2Zm} \qquad E_n = \frac{Ry}{n^2}$$

$$(n_r + \xi + 1)^{-2} = \varepsilon - 2\varepsilon^{3/2}\left(n_r + \frac{1}{2}\right) -$$

$$-4\varepsilon^2\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + 3\varepsilon^2\left(n_r + \frac{1}{2}\right)^2$$

$$E_n = -\frac{mg^4}{2\hbar^2}\varepsilon + \frac{mg^4}{2\hbar^2}2\varepsilon^{3/2}\left(n_r + \frac{1}{2}\right)$$

$$-\frac{mg^4}{2\hbar^2}4\varepsilon^2\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - 3\varepsilon^2\left(n_r + \frac{1}{2}\right)^2$$

Задачи

№9 Атом водорода подвергается воздействию однородного эл. поля (возмущение) (по z)

$$\Sigma(t) = \frac{A}{\sqrt{\pi}\,\tau} e^{-(t/\tau)^2}$$

A - const, при $t \to -\infty$ Атом в осн. сост.

при $t \to \infty \to n = 2$

Указать область применимости

$$\vec{\Sigma}(t) = \frac{A}{\sqrt{\pi}\,\tau} e^{-t^2/\tau^2} \vec{e_z}$$

$$\vec{\Sigma} = -\nabla\varphi = -\vec{e_z}\frac{\partial}{\partial z}\Phi$$

$$\Rightarrow \Phi = -\int|\vec{\Sigma}(t)|\,dz = -\frac{A}{\sqrt{\pi}\,\tau} e^{-t^2/\tau^2} z$$

$$\Rightarrow \delta\hat{V} = -e\Phi = -e\hat{z}\Sigma(t)$$

Изначально:

$n=0$: $n_z=0,\ l=0,\ m=0$

$n=2$:	2	1	1
	2	1	0
	2	1	-1
	2	0	0

$a_B = 0,\ \hbar = 1$

$$\varphi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-z}$$

$$\varphi_{200} = \frac{1}{\sqrt{8\pi}} e^{-z/2}\left(1 - \frac{z}{2}\right)$$

$$\varphi_{210} = \frac{2}{\sqrt{24}} e^{-z/2}\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$$

$$\varphi_{21\pm1} = \mp\frac{2}{\sqrt{24}} e^{-z/2}\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{\pm i\varphi}$$

$$\delta\hat{V} = \frac{Ae\,z}{\sqrt{\pi}\,\tau} e^{-\frac{t^2}{\tau^2}}\cos\theta$$

$$\delta V_{fi} = \langle\varphi_f(\vec{z})\,|\,\delta V(\vec{z},t)\,|\,\varphi_i(\vec{z})\rangle_z$$

Т.к. $e^{\pm i\varphi} = \cos\varphi \pm i\sin\varphi$

$$\Rightarrow \int_0^{2\pi} \Rightarrow \langle\varphi_{21\pm1}|\delta\hat{V}|\varphi_{100}\rangle = 0$$

Т.к. $\hat{z}$ симм. по отраж.

$\to \delta\hat{V}$ антисимм.

А φ_{100} и φ_{200} симм.

$$\Rightarrow \langle\varphi_{200}|\delta V|\varphi_{100}\rangle = 0$$

$$\Rightarrow \langle\varphi_{210}|\delta\hat{V}|\varphi_{100}\rangle =$$

$$= \frac{Ae}{\sqrt{\pi}\,\tau} e^{-t^2/\tau^2}\frac{1}{2\sqrt{2}}\iint z^4 e^{-(\,)}\cos^2\theta\,\sin\theta\,dz\,d\theta$$

$$= 6\sqrt{2}\left(\frac{2}{3}\right)^6\frac{A}{\sqrt{\pi}\,\tau} e^{-(t/\tau)^2}$$

$$\mathcal{E}_n = -\frac{me^4}{2n^2}$$

$$\Rightarrow \mathcal{E}_2 = -\frac{1}{8} \qquad \mathcal{E}_1 = -\frac{1}{2}$$

$$\omega_{21} = \frac{3}{8}$$

$$\Rightarrow \cancel{|C(t)| = -i\int_{-\infty}^{+\infty}}$$

$$W_{i\to f} = \left|\frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} 3\sqrt{8}\,a_B\left(\frac{2}{3}\right)^6\frac{A}{\sqrt{\pi}\,\tau} e^{-\left(\frac{t}{\tau}\right)^2} e^{-i\omega t}\,dt\right|^2$$

$$W_{i\to f} = 72\left(\frac{2}{3}\right)^{12} A^2 e^{-9\tau^2/128}$$

Условия применимости Т.В

$$\omega\tau \gg 1 \Rightarrow \tau \gg \frac{3}{8}\frac{\hbar}{Ry}$$

$$\left|\frac{\partial V}{\partial t}\right| \ll \hbar\omega^2 \Rightarrow A \ll \frac{\tau^3}{e a_B}\hbar\omega^2$$

$$\frac{\partial\Sigma}{\partial t} \sim \Sigma\frac{2t}{\tau^2} \sim \frac{A}{\tau^3}$$

Задачи

№10 Частица н-ся в основном состоянии в

$$U(x) = -G\,\delta(x)$$

Внезапно $G \to \tilde{G}$

Найти вероятность вылета частицы в непрерывный спектр $[p, p+dp]$

А также полную вер-ть частице покинуть яму

Волновые функции:

$$\psi_1 = \sqrt{æ_0}\, e^{-æ_0|x|}$$

$$\psi_2 = \frac{\sin(æx)}{\sqrt{\pi}}$$

$$\psi_3 = \frac{æ\cos æx - æ_0 \sin æ|x|}{\sqrt{\pi}\sqrt{æ^2+æ_0^2}}$$

где $æ_0 = \frac{mG}{\hbar^2}$

$$æ = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} = \frac{p}{\hbar}$$

$$dW = \left|\int \tilde{\psi}^* \psi\, dx\right|^2$$

т.к. ψ_1 – чет, $\tilde{\psi}_2$ – нечет $\Rightarrow \int \psi_2^* \psi_1 = 0$

$$\Rightarrow dW = \left|\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{æ\cos æx - \tilde{æ}_0 \sin æ|x|}{\sqrt{\pi}\sqrt{æ^2+\tilde{æ}_0^2}} \cdot e^{-æ_0|x|}\sqrt{æ_0}\, dx\right|^2 =$$

$$\varphi_1 = \operatorname{arctg} æ_0/æ$$

$$= \left|2\sqrt{\frac{æ_0}{\pi}}\, \mathrm{Re}\int_0^{+\infty} e^{i(æx+\varphi_1) - æ_0 x}\, dx\right|^2$$

$$= \left|\sqrt{\frac{æ_0}{\pi}}\, 2\,\mathrm{Re}\frac{e^{i\varphi_1}}{æ_0 - iæ}\right|^2 =$$

$$= \frac{4 æ_0 æ^2 (æ_0 - \tilde{æ}_0)}{\pi(æ_0^2+æ^2)(\tilde{æ}_0^2+æ^2)}\, dæ$$

$$W_{ост} = \left|\int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{æ_0\tilde{æ}_0}\, e^{-(\tilde{æ}_0+æ_0)|x|}\, dx\right|^2$$

$$= 4\frac{æ_0\tilde{æ}_0}{\tilde{æ}_0+æ_0} = \frac{4G\tilde{G}}{G+\tilde{G}}$$

$\Rightarrow W_{улетел} = 1 - W_{ост} =$

$$\Rightarrow W_{улет} = \frac{(G-\tilde{G})^2}{(G+\tilde{G})^2}$$