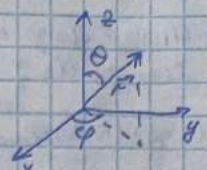


1) Найдем скалярное произведение:

$$\hat{S}_n = (\hat{S}_x, \hat{S}_y) = \left(\frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_x, \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_y \right) = \frac{\hbar}{2} (\hat{\sigma}_x \hat{n}_x + \hat{\sigma}_y \hat{n}_y + \hat{\sigma}_z \hat{n}_z) = \left\{ \text{определено с.т.} \right\} =$$

$$= \frac{\hbar}{2} (\hat{\sigma}_x \sin \theta \cos \varphi + \hat{\sigma}_y \sin \theta \sin \varphi + \hat{\sigma}_z \cos \theta) =$$

$$= \frac{\hbar}{2} \left(\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \sin \theta \cos \varphi + \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \sin \theta \sin \varphi + \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \cos \theta \right) =$$

$$= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix}$$


2) Найдем кванты $\langle \hat{S}_n \rangle_{\psi_{\pm}}$

$$\psi_{\pm} \rightarrow \hat{S}_z \psi = \lambda \psi \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_x \\ \psi_y \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \psi_x \\ \psi_y \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{vmatrix} 1-\lambda & 0 \\ 0 & -1-\lambda \end{vmatrix} = -(1-\lambda)(1+\lambda) = -(1-\lambda^2) = 0 \Rightarrow \lambda_{1,2} = \pm 1.$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_x \\ \psi_y \end{pmatrix} = 1 \begin{pmatrix} \psi_x \\ \psi_y \end{pmatrix} \Rightarrow \psi_x = \psi_x, -\psi_y = \psi_y \Rightarrow \psi_{2+} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_x \\ \psi_y \end{pmatrix} = -1 \begin{pmatrix} \psi_x \\ \psi_y \end{pmatrix} \Rightarrow \psi_x = -\psi_x, \psi_y = \psi_y \Rightarrow \psi_{2-} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\langle \hat{S}_n \rangle_{\psi_{2+}} = \langle \psi_{2+} | \hat{S}_n | \psi_{2+} \rangle = [1, 0] \cdot \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2} (1, 0) \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta e^{i\varphi} \end{pmatrix} =$$

$$= \frac{\hbar}{2} \cos \theta$$

$$\langle \hat{S}_n \rangle_{\psi_{2-}} = \langle \psi_{2-} | \hat{S}_n | \psi_{2-} \rangle = [0, 1] \cdot \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \cos \theta$$

1.1. Найдем $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2 \Rightarrow \hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$

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

$$\hbar\omega \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\xi^2}{2} \right] \psi(\xi) = E\psi(\xi) \quad \xi = \frac{x}{l_f} \quad \text{где } l_f = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \text{ — аб. длина}$$

$$\hbar\omega \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\xi^2}{2} \right] \psi = E\psi \Rightarrow \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\xi^2}{2} \right] \psi = \epsilon \psi, \quad \epsilon = \frac{E}{\hbar\omega}$$

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\xi^2}{2} \right] \psi = \epsilon \psi$$

$\psi(\xi \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0$; ищем решение как полином или exp.

$$\psi = \chi e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

используем другое exp. решение, для $\xi \rightarrow \infty$ exp. убывает.

$$\psi' = (\chi' - \xi \chi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

$$\psi'' = (\chi'' - \chi - \xi \chi') e^{-\frac{\xi^2}{2}} - \xi(\chi' - \xi \chi) e^{-\frac{\xi^2}{2}} = e^{-\frac{\xi^2}{2}} (\chi'' - \chi - 2\xi \chi' + \xi^2 \chi)$$

Подставляем: $\left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\xi^2}{2} \right] \psi = \epsilon \psi$

$$-\chi'' + \chi + 2\xi \chi' - \xi^2 \chi + \xi^2 \chi = 2\epsilon \chi$$

$$\Rightarrow \chi'' - 2\xi \chi' + (2\epsilon - 1)\chi = 0 \quad \text{где } \chi = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n$$

$$\chi' = \sum_{n=1}^{\infty} n a_n \xi^{n-1}; \quad \chi'' = \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1) a_n \xi^{n-2}$$

$$\sum_{n=2}^{\infty} n(n-1) a_n \xi^{n-2} - 2 \sum_{n=1}^{\infty} n a_n \xi^{n-1} + (2E-1) \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n = 0 \quad n-2=k$$

$$\chi = a_0 + a_1 \xi + a_2 \xi^2 + a_3 \xi^3 + \dots$$

$$\chi' = a_1 + 2a_2 \xi + 3a_3 \xi^2 + \dots$$

$$\chi'' = 2a_2 + 6a_3 \xi + \dots$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} (k+2)(k+1) a_{k+2} \xi^k - 2 \sum_{k=0}^{\infty} (k+1) a_{k+1} \xi^k + (2E-1) \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k = 0$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} (k+2)(k+1) a_{k+2} \xi^k - 2 \sum_{k=0}^{\infty} (k+1) a_{k+1} \xi^{k+1} + (2E-1) \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k = 0$$

$$(k+2)(k+1) a_{k+2} - 2k a_{k+1} + (2E-1) a_k = 0$$

$$\Rightarrow a_{k+2} = \frac{2k+1-2E}{(k+2)(k+1)} a_k \quad \text{— рекуррентное соотношение}$$

Условие для сходимости: $2k+1-2E=0 \Rightarrow E = \frac{1}{2} + N$

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

$N=0$: $a_0 \Rightarrow \psi_0 = a_0 e^{-\frac{\xi^2}{2}}$ — четн.

$N=1$: $a_{k+2} = \frac{2(k-1)}{(k+1)(k+2)} a_k$ — нечетн. функция

$a_0=0$; $a_2 \neq 0 \Rightarrow a_2=0 \Rightarrow \psi_1 = a_1 \xi e^{-\frac{\xi^2}{2}}$

$N=2$: $\psi = (a_0 + a_2 \xi^2) e^{-\frac{\xi^2}{2}}$

Полные функции

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

$$E = \frac{1}{2} + N \Rightarrow E = \hbar \omega (N + \frac{1}{2})$$



на есть стационарное ур-е Шредингера:

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

где $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ малое возмущение

Малое возмущение — возмущающая сила.

$$\hat{H}_0 \psi^{(0)} = E^{(0)} \psi^{(0)}$$

$$\psi = \sum_m C_m \psi_m^{(0)} \Rightarrow \sum_m C_m (E_m^{(0)} + \hat{V}) \psi_m^{(0)} = \sum_m C_m E \psi_m^{(0)} \quad | \cdot \langle \psi_k^{(0)} | \cdot \rangle$$

$$\int \psi_k^{(0)*} \psi_m^{(0)} d\tau = \delta_{km}$$

$$(E_k^{(0)} - E) C_k + \sum_m V_{km} C_m = 0$$

$$(E - E_k^{(0)}) C_k = \sum_m V_{km} C_m \quad (*)$$

Ищем решение в виде:

$$E = E^{(0)} + E^{(1)} + E^{(2)} + \dots; \quad C_k = C_k^{(0)} + C_k^{(1)} + C_k^{(2)} + \dots$$

Первое приближение для n-й энергии:

$$E = E_n^{(0)} + E_n^{(1)}; \quad C_k = C_k^{(0)} + C_k^{(1)} \quad \text{где } k=n.$$

$$(E_n^{(0)} + E_n^{(1)} - E_k^{(0)})(C_n^{(0)} + C_k^{(1)}) = \sum_m V_{km} C_m^{(0)}$$

$\uparrow C_m^{(0)} = \delta_{m,n}$ в 0-приближении.

учтем $k=n$.

$$\Rightarrow C_n^{(0)} E_n^{(1)} + \underbrace{C_n^{(1)} E_n^{(0)}}_{\sim 2 \text{ пор. малости}} = V_{nn} \equiv V_{nn}$$

$$C_n^{(0)} = 1.$$

$$\Rightarrow E_n^{(1)} \equiv V_{nn}$$

Поправка первого приближения к собствен. значению $E_n^{(0)}$ равна энергии возмущения в состоянии $\psi_n^{(0)}$.

Если $k \neq n$ смотрим (*)

$$(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}) C_k^{(1)} = V_{kn} \rightarrow C_k^{(1)} = \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}, \quad k \neq n$$

$\uparrow$ т.к. $C_k^{(0)} = 0, k \neq n$

2-го порядка:

$$E = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)}; \quad C_k = C_k^{(0)} + C_k^{(1)} + C_k^{(2)}, \quad k=n$$

$$(E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} - E_n^{(0)})(C_n^{(0)} + C_n^{(1)} + C_n^{(2)}) = \sum_m V_{nm} (C_m^{(0)} + C_m^{(1)})$$

$\downarrow$ $\Rightarrow$ можно рас-
гнать из уравнения

$$\underbrace{C_n^{(0)} E_n^{(1)}} + E_n^{(2)} C_n^{(0)} = \underbrace{V_{nn}} + \sum_m V_{nm} C_m^{(1)}$$

$$\Rightarrow E_n^{(2)} = \sum_m \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \equiv \sum_m \frac{V_{nm} V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

$$\Rightarrow E_n \approx E_n^{(0)} + V_{nn} + \sum_m \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

1. $\hat{H}\psi = E\psi$, где $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$

2

Если ввести безразмерные переменные:

$\rho = \sqrt{\hbar m \omega} \rho_5$; $x = \sqrt{\frac{\hbar}{m \omega}} x_5$, где $l_5 = \sqrt{\frac{\hbar}{m \omega}}$ - св. длина.
 $\Rightarrow \left[\frac{\rho^2 + x^2}{2} \right] \psi(x) = \epsilon \psi(x)$ $\epsilon = \frac{E}{\hbar \omega}$

Новые операторы:

$\hat{x} = \frac{a + a^\dagger}{\sqrt{2}}$; $\hat{p} = \frac{a - a^\dagger}{i\sqrt{2}}$

где $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ - оператор уничтожения
 $a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ - оператор рождения

$\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p} = -i$
 $\frac{(a-a^\dagger)(a+a^\dagger)}{i\sqrt{2}} - \frac{(a+a^\dagger)(a-a^\dagger)}{\sqrt{2}} = -i$

$(a-a^\dagger)(a+a^\dagger) - (a+a^\dagger)(a-a^\dagger) = 2$
 $aa + aa^\dagger - a^\dagger a - a^\dagger a^\dagger - a^\dagger a - aa^\dagger + a^\dagger a + a^\dagger a^\dagger = 2$

$\Rightarrow aa^\dagger - a^\dagger a = 1$ - коммутатор, канон. $\rightarrow aa^\dagger = a^\dagger a + 1$

$\hat{H} = \frac{1}{2} \left[\frac{(a-a^\dagger)(a+a^\dagger) + (a+a^\dagger)(a-a^\dagger)}{2} \right] = \frac{aa^\dagger + a^\dagger a}{2}$

$\Rightarrow \hat{H} = a^\dagger a + \frac{1}{2}$ $\rightarrow$ б.у.е. Гамильтона

$(a^\dagger a + \frac{1}{2})\psi(x) = \epsilon\psi(x) \Rightarrow a^\dagger a|\psi\rangle = (\epsilon - \frac{1}{2})|\psi\rangle$

$\begin{cases} \hat{a}^\dagger \hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \\ \hat{a} \hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger \hat{a} = 1 \end{cases}$

$\begin{cases} a + a^\dagger = \sqrt{2} x \\ a - a^\dagger = i\sqrt{2} p \end{cases} \Rightarrow a = \frac{x + ip}{\sqrt{2}}; a^\dagger = \frac{x - ip}{\sqrt{2}}$
 $\hat{x} \equiv x; \hat{p} = -i\partial_x$

Собственные функции: в основном состоянии $a|0\rangle = 0$ $\leftarrow$ дальше просто
 уже не может для
 оператора уничтожения

$\left(\frac{x + ip}{\sqrt{2}} \right) \psi_0(x) = 0 \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x + \partial_x \right) \psi_0(x) = 0$

$x\psi + \partial_x \psi = 0 \rightarrow x\psi = -\partial_x \psi \Rightarrow \psi_0 = C_1 e^{-\frac{x^2}{2}}$

Нормировка: $\int_{-\infty}^{+\infty} C_1^2 e^{-x^2} dx = C_1^2 \sqrt{\pi} = 1 \Rightarrow C_1 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \Rightarrow \psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}$

Далее действуем оператором рождения:

$a^\dagger|0\rangle = |1\rangle \Rightarrow a^\dagger|1\rangle = \sqrt{2}|2\rangle \Rightarrow a^\dagger|2\rangle = \sqrt{3}|3\rangle$

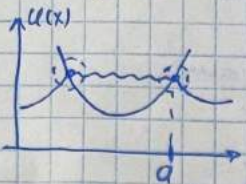
$\psi_n(x) = \langle x|n\rangle = \frac{(x - \partial_x)^n}{\sqrt{2^n n!}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot e^{-\frac{x^2}{2}}$

$\rightarrow$ действуя оператором, получаем целые функции.

$\epsilon = \frac{E}{\hbar \omega} = n + \frac{1}{2} \rightarrow E = \hbar \omega (n + \frac{1}{2})$ - этого предостаточно.

12. Применяется при рассмотрении квазиклассического случая:

$$i\hbar \psi' = [\hat{H}^{(0)} + V(x, x)] \psi \rightarrow \hat{H} \psi = E \psi, \quad V(x) \text{ и } E \text{ — ф-я}$$



Применяется метод ВКБ по формуле:

$$\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{\kappa}} e^{i \int \kappa dx} + \frac{C_2}{\sqrt{\kappa}} e^{-i \int \kappa dx}$$

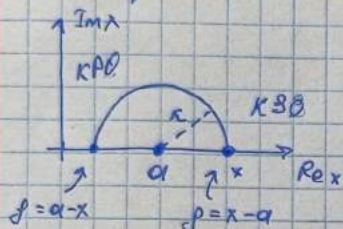
~ в классич. разрешенной области, где $E > U$.

$$\psi(x) = \frac{f_1}{\sqrt{\kappa}} e^{\int \kappa dx} + \frac{f_2}{\sqrt{\kappa}} e^{-\int \kappa dx}$$

~ в классич. запрещенной области $E < U$.

Применяется вблизи точек поворота метод ВКБ не применим. Можно использовать решение обходя эту точку:

Аппроксимировав потенциал в точке:



$$U(x) \approx U(a) + U'(a)(x-a) = E + U'(a)(x-a)$$

$$\kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (U(a) + U'(a)(x-a) - E) \approx \chi \cdot (x-a)$$

$$\Rightarrow \psi'' - \chi(x-a)\psi = 0$$

$x > a$: в КЗЗ:

$$\int_a^x \kappa(x) dx = \chi \int_a^x (x-a)^{1/2} dx = \frac{2}{3} \chi^{1/2} (x-a)^{3/2}; \quad \sqrt{\kappa} = \chi^{1/4} (x-a)^{1/4}$$

Решение уравнения с т. поворота:

$$\psi(x > a) = \frac{C_1}{\chi^{1/4} (x-a)^{1/4}} e^{-\frac{2}{3} \chi^{1/2} (x-a)^{3/2}}$$

Сделаю с т. поворота:

$$\psi = \frac{C_1}{\sqrt{\kappa(x)}} e^{i \int \kappa dx} + \frac{C_2}{\sqrt{\kappa(x)}} e^{-i \int \kappa dx}; \quad \kappa^2 = \chi(a-x)$$

$$\int_a^x \chi^{1/2} (a-x)^{1/2} dx = -\frac{2}{3} \chi^{1/2} (a-x)^{3/2}$$

$$\Rightarrow \psi(x < a) = \frac{C_1}{\chi^{1/4} (a-x)^{1/4}} e^{-i \frac{2}{3} \chi^{1/2} (a-x)^{3/2}} + \frac{C_2}{\chi^{1/4} (a-x)^{1/4}} e^{i \frac{2}{3} \chi^{1/2} (a-x)^{3/2}}$$

Нужно посмотреть как преобразуется показатель экспоненты $\sim (x-a)^{3/2}$ при обходе точки поворота по и против часовой стрелки. М.к. помещаю в точку поворота и перейду к полярным координатам.

$$(x-a) = \rho e^{i\theta} \rightarrow (x-a)^{3/2} = (\rho e^{i\theta})^{3/2}$$

$$(\rho e^{i\theta})^{3/2} = \rho^{3/2} e^{i\frac{3}{2}\theta} = -i(a-x)^{3/2} \rightarrow \text{фаза } \theta \text{ как в КРД}$$

В знаменателе:

$$(x-a)^{1/4} \rightarrow (e^{i\theta} (a-x))^{1/4} = (a-x)^{1/4} e^{i\frac{\theta}{4}}, \text{ т.е. при повороте КЗЗ} \rightarrow \text{КРД}$$

$$\frac{1}{\chi^{1/4} (x-a)^{1/4}} \rightarrow \frac{1}{\chi^{1/4} e^{i\frac{\theta}{4}} (a-x)^{1/4}} \Rightarrow C_1 = 1 e^{i\frac{\pi}{4}}$$

Обойдем контур по часовой стрелке (около угла будет отрицательным):

$$(x-a)^{1/4} \rightarrow (e^{-i\theta} (a-x))^{1/4} = e^{-i\frac{\theta}{4}} (a-x)^{1/4}$$

$$\frac{1}{\chi^{1/4} (x-a)^{1/4}} \rightarrow \frac{1}{\chi^{1/4} (a-x)^{1/4} \cdot e^{-i\frac{\theta}{4}}} \Rightarrow C_2 = 1 e^{-i\frac{\pi}{4}}$$

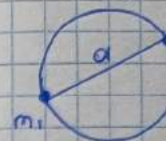
В.ф. в КР

$$\psi(x < a) =$$

$$= \frac{2}{\sqrt{\kappa}}$$

~ в классич. разрешенной области, где $E > U$.

13. Поворот,



$$\hat{L}_2 = -i$$

= 7

Корреляция

Порядок

$$-h^2$$

$$m=0;$$

Остальное

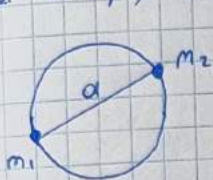
В.Ф. в КРД:

$$\psi(x < a) = \frac{1}{\sqrt{\kappa}} e^{-\frac{2}{3} i \chi^{1/2} (a-x)^{3/2} + i \frac{\pi}{4}} + \frac{1}{\sqrt{\kappa}} e^{\frac{2}{3} i \chi^{1/2} (a-x)^{3/2} - i \frac{\pi}{4}} =$$

$$= \frac{2}{\sqrt{\kappa}} \cos\left(\frac{2}{3} \chi^{1/2} (a-x)^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) = \frac{2}{\sqrt{\kappa}} \cos\left(\int_a^x \kappa dx + \frac{\pi}{4}\right) = \frac{2}{\sqrt{\kappa}} \cos\left(\int_a^x \kappa dx - \frac{\pi}{4}\right)$$

$\Rightarrow$ Фр. обращения рождится такая фазовая

1.3. Ротор, $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \sim$ приведенная масса.



$$\hat{H} \psi(\varphi) = E \psi(\varphi)$$

$\rightarrow$ кинетический импульс - связан с вращением.

$$\hat{H} = \frac{L_z^2}{2I}$$

$$\left(\frac{L_z^2}{2I} - E\right) \psi = 0 \Rightarrow (L_z^2 - 2IE) \psi = 0$$

$$\hat{L}_z = -i \hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} = \frac{i \lambda}{\hbar} f(\varphi) \quad \text{уф.е на собств. значения}$$

$$\Rightarrow f(\varphi) = C_1 e^{i \frac{\lambda}{\hbar} \varphi} = \left\{ \frac{\lambda}{\hbar} = m \right\}_{\text{целое число}} = C_1 e^{i m \varphi} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i m \varphi}$$

подобие ф-а должна до периодичности. $f(\varphi) = f(\varphi + 2\pi)$

Нормировка: $C_1^2 \int_0^{2\pi} e^{i m \varphi} e^{-i m \varphi} d\varphi = 1$

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

Подставляем в ф-е Шредингера:

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} - 2IE f = 0$$

$$\hbar^2 \frac{m^2}{2\pi} e^{i m \varphi} - 2IE \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i m \varphi} = 0 \Rightarrow E = \frac{\hbar^2 m^2}{2I}$$

$m=0$; $E=0 \rightarrow$ нет вырождения

Остальные $m = \pm 1, \pm 2, \dots \rightarrow$ двукратное вырождение

р3. Коммутатор L^2 и L_x .

3

$$[\hat{L}_x, \hat{L}^2] = \{L^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2\} = [\hat{L}_x, \hat{L}_x^2] + [\hat{L}_x, \hat{L}_y^2] + [\hat{L}_x, \hat{L}_z^2]$$

$$= \vec{L} = [\vec{r}, \vec{p}] = \begin{vmatrix} \vec{r}_0 & \vec{p}_0 & \vec{z}_0 \\ x & y & z \\ -i\hbar\partial_x & -i\hbar\partial_y & -i\hbar\partial_z \end{vmatrix}$$

$$\Rightarrow \hat{L}_x = (y\partial_z - z\partial_y)(-i\hbar) = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y$$

$$\hat{L}_y = (-i\hbar)(+z\partial_x - x\partial_z) = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z$$

$$\hat{L}_z = (-i\hbar)(-x\partial_y + y\partial_x) = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x$$

$$\begin{matrix} \vec{r} & \vec{p} \\ x & y \\ z & z \end{matrix}$$

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x; \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y$$

$$\hat{L}_x\hat{L}_x^2 - \hat{L}_x^2\hat{L}_x = 0$$

$$\Rightarrow [\hat{L}_x, \hat{L}^2] = \hat{L}_x\hat{L}_y^2 - \hat{L}_y^2\hat{L}_x + \hat{L}_x\hat{L}_z^2 - \hat{L}_z^2\hat{L}_x = (\hat{L}_x\hat{L}_y)\hat{L}_y - \hat{L}_y(\hat{L}_y\hat{L}_x) +$$

$$+ (\hat{L}_x\hat{L}_z)\hat{L}_z - \hat{L}_z(\hat{L}_z\hat{L}_x) \equiv$$

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

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

$$\equiv \hat{L}_y\hat{L}_x\hat{L}_y + i\hbar\hat{L}_z\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x\hat{L}_y + i\hbar\hat{L}_y\hat{L}_z + \hat{L}_z\hat{L}_x\hat{L}_z - i\hbar\hat{L}_y\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_x\hat{L}_z - i\hbar\hat{L}_z\hat{L}_y = 0$$

Так можно доказать для любой проекции:

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

р2. Квазиклассическое приближение фазовости для зр-я Шредингера

Виде: $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = [H^0 + V(t, x)]\psi$, где $V(t, x)$ - возмущение, зр-я р-я

$U(x)$ $\hat{H}\psi = E\psi$ - стационарной нестационарной $V(x)$

В КРД: $E > 0$.

$$\psi_{xx} + \kappa^2(x)\psi = 0, \text{ где } \kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(x)]$$

В КЗД:

$$\psi_{xx} - \kappa^2(x)\psi = 0 \Rightarrow \kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2}[U(x) - E]$$

Ищем решение в виде: $\psi = A(x)e^{i\theta(x)}$

$$\psi' = (A' + i\theta'A)e^{i\theta}$$

$$\psi'' = (A'' + i\theta''A + i\theta'A')e^{i\theta} + i\theta'(A' + i\theta'A)e^{i\theta}$$

$$\Rightarrow A'' + i\theta''A + i\theta'A' + i\theta'A' - \theta'^2A + \kappa^2A = 0$$

$$A'' + 2i\theta'A' + i\theta''A - (\theta')^2A + \kappa^2A = 0$$

Решим на Re и Im:

$$\begin{cases} A'' + \kappa^2 A - \theta_1^2 A = 0 \\ 2A'\theta_1' + A\theta_1'' = 0 \end{cases} \quad \text{при } A \rightarrow \frac{\partial}{\partial x} (A'\theta_1') = 0$$

Откинем A'' - как малое, когда $\frac{A''}{A} \ll \kappa^2$

$$\Rightarrow \theta_1^2 = \kappa^2 \rightarrow \theta_1 = \pm \int \kappa dx$$

$A'' \kappa = C \rightarrow$ тогда в КРО и КЗО получим:

$$\psi = \frac{C_1}{\sqrt{\kappa}} e^{i \int \kappa dx} + \frac{C_2}{\sqrt{\kappa}} e^{-i \int \kappa dx}$$

$$\psi = \frac{d_1}{\sqrt{\kappa}} e^{\int \kappa dx} + \frac{d_2}{\sqrt{\kappa}} e^{-\int \kappa dx}$$

Покажем точность?

$$A'' \kappa = C \Rightarrow A \sim \kappa^{-1/2} \Rightarrow A' \sim -\frac{1}{2} \kappa^{-3/2} \kappa'$$

$$A''_{xx} = -\frac{1}{2} \kappa^{-3/2} \kappa'' + \frac{3}{4} \kappa^{-5/2} \kappa'^2$$

$$\left| \frac{A''}{A} \right| \sim \left| \frac{3}{4} \kappa^{-2} \kappa'^2 - \frac{1}{2} \kappa^{-1} \kappa'' \right| \ll \kappa^2 \quad \sim \text{задавали приближение.}$$

т.е. доказано было.

$$\kappa'^2 \kappa'^2 \ll \kappa^2 \Rightarrow \boxed{\kappa' \ll \kappa^2} \quad \text{либо } \kappa^2 \text{ большое, либо } \kappa' \rightarrow 0$$

при $\kappa \rightarrow 0$ тогда ВКБ не применим

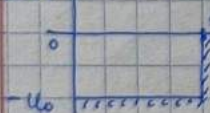
$$\kappa' \ll \kappa^2 \Rightarrow \kappa'' \ll 2\kappa \kappa'$$

$$\kappa = \frac{2\pi}{\lambda}; \quad \kappa' = -\frac{2\pi}{\lambda^2} \lambda'$$

$$-\frac{2\pi}{\lambda^2} \lambda' \ll \frac{(2\pi)^2}{\lambda^2} \Rightarrow \left\{ \lambda' \ll 2\pi \sim 1 \right\}$$

т.е. : изменение длины волны на расстоянии порядка длины волны мало.

$\kappa \perp$



В сферической системе координат имеем:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{L}^2}{r^2} \quad \leftarrow \text{предположим, что условия}$$

$$\hat{L}^2 = -\sin^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}$$

$$\Rightarrow \hat{H} \psi = E \psi \Rightarrow \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{L}^2}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} U(r) - \frac{2mE}{\hbar^2} \right] \psi(r, \theta, \varphi) = 0$$

где решение: $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_{\ell, m}(\theta, \varphi)$

$R_{\ell, m}(r) \sim$ сферические функции, у которых есть энергия зависит как-то от радиуса в пространстве.

Сферическая симметрия дает, что $Y_{\ell, m} \neq \text{const} \Rightarrow \ell=0, m=0$

$$r > a: \quad \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) R + \kappa^2 R = 0, \quad \kappa^2 = \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)$$

$$r < a: \quad \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) R + \kappa^2 R = 0, \quad \text{где } \kappa = \frac{2m}{\hbar^2} (E + U_0)$$

Условия сшивки $\rightarrow R(a)$ - непрерыв. + не должно быть осев. в нуле.
 $R'(a)$ - непрерыв.

$E < 0$, задаем: $\kappa^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2}$; $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - |E|)$

$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial R}{\partial r} - \kappa^2 R = 0$ для $r > a$

$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial R}{\partial r} + k^2 R = 0$ для $r < a$

Решение в виде: $R = \frac{\chi}{r}$

$\chi = C_1 \cos \kappa r + C_2 \sin \kappa r$

не подходит, в нуле $\rightarrow \infty$

$\Rightarrow \chi = d_1 \sin \kappa r$

Вне ямы $\chi = d_2 e^{-\kappa(r-a)}$ - просто удобно выбирать так константы.

$d_1 \sin \kappa a = d_2$

$d_1 \kappa \cos \kappa a = -\kappa d_2$

$\Rightarrow \kappa \tan \kappa a = -\kappa / \alpha$

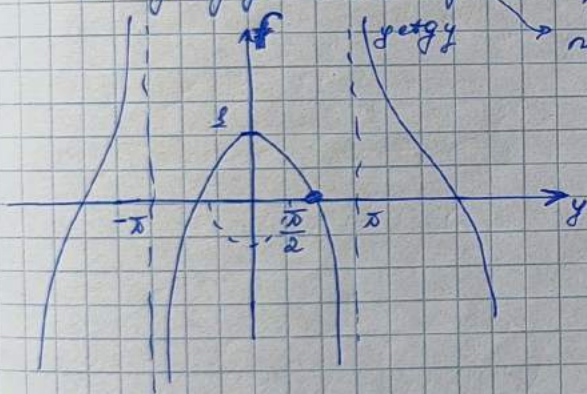
$\kappa a \tan \kappa a = -\kappa a$; $\kappa a \equiv y$, $\kappa a \equiv z$

$\kappa a = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - |E|)} a = y$; $\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}|E|} a = z$

введем $w = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} U_0} a \Rightarrow z^2 = w^2 - y^2$

$\Rightarrow y \tan y = -\sqrt{w^2 - y^2}$ - трансцендентное ур-е.

по окружности сдвига.



Первый корень, когда $w = \frac{\pi}{2}$

$w > (\frac{\pi}{2} + \pi n)$

т.е. можно опре-ть миним. ширину ямы из условия.

$\sqrt{\frac{2m U_0}{\hbar^2}} a = \frac{\pi}{2}$

~ если менять уровни в квант. яме.

$$N2. \quad H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \alpha x^3$$

4

В случае без возмущения: $\hat{H}^{(0)} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$

Безразмерные величины: $L_{x0} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = L_y$; $\xi = \frac{x}{L_y}$

Нормы: $\frac{x}{L_y} = \frac{a+a^\dagger}{\sqrt{2}}$; $\frac{p}{p_y} = \frac{a-a^\dagger}{i\sqrt{2}}$ где $p_y = \frac{\hbar}{L_y} = \sqrt{m\omega\hbar}$

$$\hat{V} = \alpha (a+a^\dagger)^3$$

$$H_0 = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right] = \hbar\omega \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\xi^2}{2} \right) = \frac{\hbar\omega}{2} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \xi^2 \right)$$

$$H_0 = \hbar\omega a^\dagger a$$

Получим для энергии в 1м и 2м приближении:

$$E_k = E_k^0 + V_{kk} + \sum_{m \neq k} \frac{|V_{km}|^2}{E_k^0 - E_m^0}$$

$$V_{kk} = \langle k | (a+a^\dagger)^3 | k \rangle = \underbrace{\langle k | a^3 | k \rangle}_{\substack{\sim \langle k | k-3 \rangle \\ = 0}} + \underbrace{\langle k | a^2 a^\dagger + a a^\dagger a + a^\dagger a^2 + a^\dagger a a^\dagger + a a^\dagger a^\dagger + a^\dagger a^\dagger a | k \rangle}_{\substack{\sim \langle k | k+1 \rangle = 0}} = 0$$

исп-ая: $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$

$a^\dagger|n-1\rangle = \sqrt{n}|n\rangle \Leftrightarrow a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ (или наоборот)

$$V_{km} = \langle k | (a+a^\dagger)^3 | m \rangle = \langle k | a^3 + a^2 a^\dagger + a a^\dagger a + a^\dagger a^2 + a^\dagger a a^\dagger + a^\dagger a^\dagger a | k \rangle$$

$$\langle k | a^3 | m \rangle = \langle k | \sqrt{m(m-1)(m-2)} | m-3 \rangle \Rightarrow m-3=k \rightarrow m=k+3$$

$$\langle k | a^2 a^\dagger | m \rangle = \langle k | a^2 \cdot \sqrt{m+1} | m+1 \rangle = \langle k | a^2 | m+1 \rangle = \sqrt{m+1} \sqrt{m} \langle k | m-1 \rangle$$

$$\Rightarrow m=k+1$$

$$\langle k | a^{+3} | m \rangle = \sqrt{(m+1)(m+2)(m+3)} \langle k | m+3 \rangle \Rightarrow m=k-3$$

$$\langle k | a^{+2} a | m \rangle = \langle k | a^{+2} \sqrt{m} | m-1 \rangle = \sqrt{m} \langle k | a^+ \sqrt{m} | m \rangle = m \sqrt{m+1} \langle k | m+1 \rangle =$$

$$\Rightarrow m=k-1$$

$$\langle k | a a^\dagger a | m \rangle = \sqrt{m} \langle k | a a^\dagger | m-1 \rangle = m \langle k | a | m \rangle = m \sqrt{m} \langle k | m-1 \rangle \Rightarrow m=k+1$$

и т.д. нужно проделать в общем.

NB. $\vec{L} = [\vec{r} \times \vec{p}] = -i \begin{vmatrix} \vec{x}_0 & \vec{y}_0 & \vec{z}_0 \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix} \equiv \begin{vmatrix} \vec{x}_0 & \vec{y}_0 & \vec{z}_0 \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix}$

Раскрывая определитель:

$$\begin{aligned} L_x &= y p_z - z p_y \\ L_y &= z p_x - x p_z \\ L_z &= x p_y - y p_x \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= L_x L_y - L_y L_x = (y p_z - z p_y)(z p_x - x p_z) - (z p_x - x p_z)(y p_z - z p_y) = \\ &= y p_z z p_x - y p_z x p_z - z p_y z p_x + z p_y x p_z - z p_x y p_z + z p_x z p_y + x p_z y p_z - x p_z z p_y = \\ &= x p_z z p_y \quad \text{аннулируется софр.} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} -y p_z x p_z &\sim -y p_z (x p_z \psi) \sim -y x \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \quad \text{софр.} \\ x p_z y p_z &\sim y x \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \end{aligned}$$

$$\equiv y p_z z p_x + z p_y x p_z - z p_x y p_z - x p_z z p_y$$

$$y p_z z p_x \psi = +i y \frac{\partial}{\partial z} \left(z \cdot \left(-i \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \right) = z y p_z p_x \psi - i y p_x \psi$$

$$x p_z z p_y \psi = \{ \text{меняем } x \leftrightarrow y \} = -i x p_y \psi + z x p_z p_y \psi$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow (L_x L_y - L_y L_x) \psi &= -i y p_x \psi + z y p_z p_x \psi + z p_y x p_z \psi - z p_x y p_z \psi + \\ &+ i x p_y \psi - z x p_z p_y \psi = -i (y p_x - x p_y) \psi \equiv +i L_z \psi \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \begin{cases} L_x L_y - L_y L_x = i L_z \\ L_z L_x - L_x L_z = i L_y \\ L_y L_z - L_z L_y = i L_x \end{cases} &\rightarrow \text{далее можно свести преобразование} \\ &\quad \begin{matrix} x & y \\ z & \leftarrow \end{matrix} \end{aligned}$$

NB. В сферической системе координат импульс можно записать:

$$p^2 = -\hbar^2 \Delta, \quad \Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{L^2}{r^2} \quad \text{и показываем, что удовлетворяет лапласову св. сферич. координат.}$$

$$\Rightarrow \hat{H} \psi = E \psi \Rightarrow \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{L^2}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} U(r) - \frac{2mE}{\hbar^2} \right] \psi(r) = 0$$

ре решение: $\psi(r) = R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$ - сферические гармоники.

$R_{l,m}(r)$ - Если U потенциала есть центральное, и потенциал не зависит от угла (и угол не фиксируется) - то она будет как то зависеть, в каком-то направлении.

З.в. числа: E - энергия, l - орбитальное квантовое число, m - магнитное к.в. число. Но m явно нет, по нему вырождение, т.е. все 3 можно повернуть как угодно.

Свободное движение: $U(r) = 0$

$$\Rightarrow \left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right] R_{k,l}(r) = 0$$

Если $l=0$: $\left(\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} + k^2 \right) R_{k,0}(r) = 0$ → решение в виде сферической волны.

$R = \frac{e^{i k r}}{r}$ → решение при $r=0$ особенность сфер → не подходит
 $\Rightarrow R = \frac{\sin k r}{r}$ → при $r \rightarrow \infty$

$$\int_{-\infty}^{\infty} R_{k,0} R_{k',0} r^2 dr = \delta\left(\frac{k-k'}{2\pi}\right) \text{ нормировка}$$

Если $l \neq 0$, при $r \rightarrow 0$ будет преобладать $\frac{l(l+1)}{r^2}$, тогда

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R = 0 \text{ — ур-е Эйлера}$$

$$R(r) = r^{\nu} \rightarrow \frac{dR}{dr} \sim \nu r^{\nu-1}; \quad r^2 \frac{dR}{dr} \sim \nu r^{\nu+1}$$

$$\nu(\nu+1) r^{\nu} - l(l+1) r^{\nu} = 0 \Rightarrow \nu(\nu+1) - l(l+1) = 0 \rightarrow \nu_1 = l$$

$$\Rightarrow R(r \rightarrow 0) = C_1 r^l$$

$$\nu_2 = -l-1 \text{ не может быть.}$$

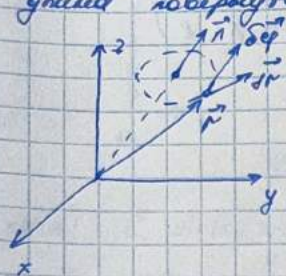
А на бесконечности раскрывается как сферическая волна: тогда можно преобразовать $\frac{l(l+1)}{r^2}$.

В общем случае:

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right] R_{k,l}(r) = 0 \text{ — ур-е сферических ф-ий Бесселя. (ф-ия Клеймана с особенностью в нуле.)}$$

н.д. Как задать оператор поворота? Нулевое $\delta \vec{r} \perp \vec{r}$, фазой $\delta \varphi$ мал, подобен
длина повернутого вектора не изменяется.

5



Если ввести ось вращения $\vec{n}$, то поворот
можно описать с помощью вектора:

$$\delta \vec{r} = \vec{n} \delta \varphi : \quad \delta \vec{r} = [\delta \vec{\varphi} \times \vec{r}]$$

$$\psi(\vec{r} + \delta \vec{r}) = \psi(\vec{r}) + \delta \vec{r} \cdot \nabla \psi(\vec{r}) = (1 + \delta \vec{r} \cdot \nabla) \psi(\vec{r}) =$$

$$= \left(1 + ([\delta \vec{\varphi} \times \vec{r}] \cdot \nabla) \right) \psi(\vec{r})$$

или $\psi(\vec{r} + \delta \vec{r}) = \left\{ 1 + \delta \vec{\varphi} \cdot [\vec{r} \times \nabla] \right\} \psi(\vec{r})$

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

$$\Rightarrow \hat{L} \delta \vec{\varphi} = \frac{i}{\hbar} \delta \vec{\varphi} \cdot \hat{L} \quad \text{оператор малого поворота}$$

а $\hat{L} = \hbar \vec{e}$, $\vec{e}$ - орбитальный момент, $\vec{e} = [\vec{r} \times \vec{k}]$ - вводится
как безразмерная величина.

Аналогично операторам формирования и уничтожения в формализме
создающего и уничтожающего "повышающий" и "понижающий" операторы

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y \quad (\text{не эрмитовы})$$

Из коммутационных соотношений можно показать, что $L_{\pm}$ и L_z действуют на некоторую собствен. ф-лу с собствен. числом m
(магнитное к.в. квант. оператора L_z) $\rightarrow$ получают собствен. ф-лу с
числами $m+1$ и $m-1$ соответственно.

Чтобы получить матрицы выразим:

$$\hat{L}^2 |l, m\rangle = l(l+1) |l, m\rangle \quad | \cdot \langle l, m | \rangle \quad l - \text{орбитальное к.в. число}$$

$$\hat{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

$$\langle l, m | L_x L_x | l, m \rangle + m^2 - m = l(l+1)$$

$$\langle l, m | L_x L_x | l, m \rangle = l^2 - m^2 + (l+m) = (l+m)(l-m+1)$$

$$\sum_k \langle l, m | L_x | l, k \rangle \langle l, k | L_x | l, m \rangle \sim \langle l, m | L_x | l, m-1 \rangle$$

$$\sim \sum_k \langle l, m | L_x | l, k+1 \rangle \langle l, k+1 | L_x | l, m-1 \rangle \sim$$

$$\sim \sum_k \delta_{m, k+1} \delta_{k, m-1} \quad \text{т.к. } k = m-1$$

$$\Rightarrow \langle l, m | L_x | l, m-1 \rangle \langle l, m-1 | L_x | l, m \rangle = \langle l, m | L_x L_x | l, m \rangle$$

$\Rightarrow$ по-другому

$$\langle l, m | L_x L_x | l, m \rangle = \left\{ \langle l, m | L_x | l, m-1 \rangle \right\}^2 = \left\{ \langle l, m-1 | L_x | l, m \rangle \right\}^2$$

$$\Rightarrow \langle l, m | L_x | l, m-1 \rangle = \sqrt{(l+m)(l-m+1)} = \langle l, m-1 | L_x | l, m \rangle$$

а по сути получили известное
значение

$$l=1: \hat{L}^2 |l, m\rangle = l(l+1) |l, m\rangle$$

$$\langle l, m | \hat{L}^2 |l, m\rangle = l(l+1) \rightarrow \text{т.е. глав. напр.}$$

$$\hat{L}^2 = 2 \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$L_z |l, m\rangle = m |l, m\rangle \quad | \cdot \langle l', m' |$$

$$\langle l', m' | L_z |l, m\rangle = m \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad \text{— глав. напр.}$$

$$l=1 \rightarrow m = -1, 0, 1.$$

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

$$L_{\pm}: \langle l, m \pm 1 | L_{\pm} |l, m\rangle = \sqrt{l(l+1)(l \mp m + 1)}$$

$$m' = m \pm 1 \rightarrow m = m' \mp 1$$

$$L_{\pm} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

$$L_{\pm}: \langle l, m | L_{\pm} |l, m \mp 1\rangle$$

$$L_{\pm} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ -\sqrt{2} & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

из них L_x и L_y

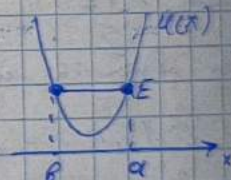
нз. Шредингера ВРБ рассматриваем в квазиклассическом приближении:

$$\left[\hat{p}^2 + U(x) \right] \psi = E \psi, \quad \text{где } \psi = A(x) e^{i\Phi(x)} \quad \text{— полн. инт. ф-я.}$$

Для гармонического осциллятора соотв. параболический потенциал:

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

$$\psi'' + \kappa^2(x) \psi = 0, \quad \text{где } \kappa^2(x) = \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right)$$



Точка поворота:

$$x^{*2} = \frac{2E}{m\omega^2} \rightarrow E = \frac{m\omega^2 x^{*2}}{2}$$

$$\Rightarrow \psi'' + \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} (x^{*2} - x^2) \psi = 0$$

Исп-ли правило квантования Бора-Зоммерфельда:

$$\int_{x_0}^{x^*} \kappa dx = \pi \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{— электр. разрег. классическ. экстрем. в зоне тунн. дискретизации.}$$

$$l_y = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \Rightarrow \kappa = \frac{1}{l_y} \sqrt{x^{*2} - x^2}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{l_y^2} \int_{-x^*}^{x^*} \sqrt{x^{*2} - x^2} dx = \frac{2}{l_y^2} \int_0^{x^*} \sqrt{x^{*2} - x^2} dx = \left\{ x = x^* \sin \varphi \rightarrow dx = x^* \cos \varphi d\varphi \right\} =$$

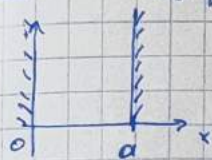
$$= \frac{2}{l_y^2} x^{*2} \int_0^{\pi/2} \cos^2 \varphi d\varphi = \frac{2x^{*2}}{l_y^2} \int_0^{\pi/2} \frac{1 + \cos 2\varphi}{2} d\varphi = \frac{2x^{*2}}{l_y^2} \left(\frac{\pi}{4} \right) =$$

$$= \frac{\pi E}{m\omega^2} \cdot \frac{\pi}{4} \cdot \frac{m\omega}{\hbar} = \pi \left(n + \frac{1}{2} \right) \Rightarrow E = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

Но в.ф.: $\psi(x) \sim \frac{C_1}{\sqrt{\kappa}} e^{i\int \kappa dx} + \frac{C_2}{\sqrt{\kappa}} e^{-i\int \kappa dx} \rightarrow \text{неверно.}$

Совпадение с точными ответами связано с выбором симметрич. значений.

19. В невозбужденном состоянии для б.т. ямы (8.23)



$$\hat{H}\psi = E\psi; \quad \psi(0) = \psi(a) = 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = E\psi; \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = 0$$

$$\psi(x) = C_1 \sin kx + C_2 \cos kx; \quad \psi(0) \rightarrow C_2 = 0$$

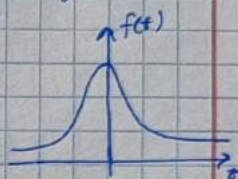
$$\psi(a) = C_1 \sin(ka) = 0 \rightarrow k = \frac{\pi n}{a} \Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}$$

$$\int_0^a |\psi_n(x)|^2 dx = \int_0^a C_1^2 \sin^2\left(\frac{\pi n x}{a}\right) dx = C_1^2 \cdot \frac{a}{2} = 1 \Rightarrow \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi n x}{a}\right)$$

Соответствующие амплитуды для вероятностей перехода в случае слабого (короткого) возмущения:

$$C_{kn}^{(1)}(t \rightarrow \infty) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt' V_{kn}(t') e^{-\frac{i(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})t'}{\hbar}}$$

$$V(x, t) = -x F_0 e^{-\frac{t^2}{\tau^2}}$$



Изначально являясь силой в основном состоянии $n=1 \rightarrow k=1 \rightarrow V_{11} \rightarrow 1$.

$$V_{k1}(t) = -\int_0^a \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi k x}{a}\right) x F_0 e^{-\frac{t^2}{\tau^2}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx =$$

$$= -\frac{F_0 e^{-\frac{t^2}{\tau^2}}}{a} \int_0^a x \left[\cos\left(\frac{\pi x}{a}(k-1)\right) - \cos\left(\frac{\pi x}{a}(k+1)\right) \right] dx = \left\{ \text{по табл. } \int \cos \frac{\pi x}{a}(k-1) dx \right.$$

$$= -\frac{1}{a} F_0 e^{-\frac{t^2}{\tau^2}} \left[\frac{ax}{\pi(k-1)} \sin\left(\frac{\pi x}{a}(k-1)\right) \right]_0^a - \int_0^a \frac{a}{\pi(k-1)} \sin \frac{\pi x}{a}(k-1) dx \Bigg] +$$

$$+ \frac{a^2}{\pi^2(k+1)^2} \left((-1)^{k+1} - 1 \right) \Bigg] \quad \text{---} \quad \frac{a^2}{\pi^2(k-1)^2} \left((-1)^{k-1} - 1 \right)$$

$$\textcircled{=} -\frac{1}{a} F_0 e^{-\frac{t^2}{\tau^2}} \cdot \frac{a^2}{\pi^2} \left[\frac{1}{(k-1)^2} \left((-1)^{k-1} - 1 \right) - \frac{1}{(k+1)^2} \left((-1)^{k+1} - 1 \right) \right] =$$

$$= \frac{1}{a} F_0 e^{-\frac{t^2}{\tau^2}} \frac{a^2}{\pi^2} \left((-1)^k + 1 \right) \cdot \left[\frac{k^2 + 2k + 1 - k^2 + 2k - 1}{(k^2 - 1)^2} \right] =$$

$$= F_0 \frac{a}{\pi^2} \left((-1)^k + 1 \right) \left(\frac{4k}{(k^2 - 1)^2} \right) e^{-\frac{t^2}{\tau^2}} = V_{k1}(t)$$

Подставляем: $\omega_{k,1}^{(0)} = \frac{E_k^{(0)} - E_1^{(0)}}{\hbar}$

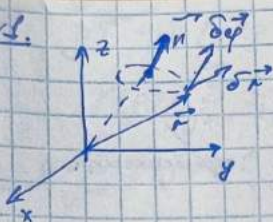
$$\Rightarrow C_{k1}^{(1)} = \int_{-\infty}^{+\infty} -\frac{i}{\hbar} e^{(-\frac{t^2}{\tau^2} + i\omega_{k,1}^{(0)}t)} dt \cdot F_0 \frac{a}{\pi^2} \left((-1)^k + 1 \right) \left(\frac{4k}{(k^2 - 1)^2} \right) \textcircled{=}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha t^2 + \beta t} dt = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{\frac{\beta^2}{4\alpha}}$$

$$\textcircled{=} -\frac{i}{\hbar} \sqrt{\pi} e^{-\frac{(\omega_{k,1}^{(0)})^2 \tau^4}{4}} \cdot F_0 \frac{a}{\pi^2} \left((-1)^k + 1 \right) \left(\frac{4k}{(k^2 - 1)^2} \right)$$

$$|C_{k1}^{(1)}|^2 \rightarrow \text{ответ.}$$

н.д.



как задать оператор поворота? Нулевое $\delta \vec{r} \perp \vec{r}$, значит $\delta \vec{r}$ мал, подобен длине повернутого вектора не изменилась.
Если ввести ось вращения $\vec{n}$, то поворот можно описать с помощью вектора:

$$\delta \vec{r} = \vec{n} \delta \phi, \text{ где } \delta \vec{r} = [\delta \vec{\phi} \times \vec{r}]$$

$$\psi(\vec{r} + \delta \vec{r}) = \psi(\vec{r}) + \delta \vec{r} \cdot \nabla \psi(\vec{r}) = (1 + \delta \vec{r} \cdot \nabla) \psi(\vec{r}) = \{1 + ([\delta \vec{\phi} \times \vec{r}] \cdot \nabla)\} \psi(\vec{r})$$

$$\text{или } \psi(\vec{r} + \delta \vec{r}) = \{1 + \delta \vec{\phi} [\vec{r} \times \nabla]\} \psi(\vec{r})$$

$$\vec{L} = [\vec{r} \times \vec{p}] = -i\hbar [\vec{r} \times \nabla] \Rightarrow \hat{L}_{\delta \vec{\phi}} = \frac{i}{\hbar} \delta \vec{\phi} \cdot \vec{L} - \text{оператор малого поворота.}$$

Можно написать квадратичная, введенная орбитальными моментами, как безразмерная величина:

$$\vec{L} = \hbar \vec{L}, \text{ где } \vec{L} = [\vec{r} \times \vec{k}]$$

$$\Rightarrow \vec{L} = [\vec{r} \times \vec{k}] = -i \begin{vmatrix} \vec{r}_0 & \vec{r}_1 & \vec{r}_2 \\ \vec{k}_0 & \vec{k}_1 & \vec{k}_2 \end{vmatrix} = -i \begin{vmatrix} x_0 & y_0 & z_0 \\ x & y & z \\ k_x & k_y & k_z \end{vmatrix}$$

Проекции:

$$\begin{aligned} L_x &= y k_z - z k_y \\ L_y &= z k_x - x k_z \\ L_z &= x k_y - y k_x \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= L_x L_y - L_y L_x = (y k_z - z k_y)(z k_x - x k_z) - (z k_x - x k_z)(y k_z - z k_y) = \\ &= y k_z z k_x - y k_z x k_z - z k_y z k_x + z k_y x k_z - z k_x y k_z + z k_x z k_y + x k_z y k_z - x k_z z k_y = \\ &\equiv y k_z z k_x + z k_y x k_z - z k_x y k_z - x k_z z k_y \end{aligned}$$

$$y k_z z k_x \psi = -i y \frac{\partial}{\partial z} (z (-i \frac{\partial \psi}{\partial x})) = z y k_z k_x \psi - i y k_x \psi$$

$$x k_z z k_y \psi = \{ \text{меняя } x \leftrightarrow y \} = -i x k_y \psi + z x k_z k_y \psi$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow (L_x L_y - L_y L_x) \psi &= -i y k_x \psi + z y k_z k_x \psi + z k_y x k_z \psi - z k_x y k_z \psi + i x k_y \psi - z x k_z k_y \psi = \\ &= -i(y k_x - x k_y) \psi \equiv i L_z \psi \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow L_x L_y - L_y L_x &= i L_z \\ L_y L_x - L_x L_y &= i L_y \\ L_y L_z - L_z L_y &= i L_x \end{aligned}$$

используя их можно показать, что $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ коммутирует с любой из компонент.

$$\Rightarrow [L_x, L^2] = 0$$

в.3. Атом водорода - фермионов гелий атом.

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \quad (\text{в СИ})$$

$\hat{H}\psi = E\psi$; $\psi(\vec{r}) = R(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ - сферические гармоники.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) - \frac{e^2}{r} \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right] \psi = E\psi$$

$$R(r) = \frac{u(r)}{r}$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] u = -|E|u$$

Обозначим: $\kappa = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$; $\rho = \kappa r$

$$\frac{d}{dr} = \frac{d}{d\rho} \cdot \frac{d\rho}{dr} = \kappa \frac{d}{d\rho}; \quad \frac{d^2}{dr^2} = \frac{2m|E|}{\hbar^2} \frac{d^2}{d\rho^2}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m|E|} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[-\frac{e^2}{2m\hbar^2 |E|} \cdot \frac{1}{r} + \frac{\hbar^2}{2m|E|} \cdot \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u = -u$$

$$-\frac{1}{\kappa^2} \frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{1}{\kappa^2} \left[-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u = -u$$

$$-\frac{d^2 u}{d\rho^2} + \frac{1}{\kappa^2} \left[-\frac{2m e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} + \frac{l(l+1) \kappa^2}{\rho^2} \right] u = -u$$

$$-\frac{d^2 u}{d\rho^2} + \left[-\frac{2m e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 \kappa} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u = -u$$

Вспомогат. $\rho_0 = \frac{2m e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 \kappa}$

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} = \left[1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u$$

Асимптотическое $u(\rho)$: $\rho \rightarrow \infty \Rightarrow \frac{d^2 u}{d\rho^2} = -u \Rightarrow u = A e^{-\rho} + B e^{\rho}$

$\rho \rightarrow 0$: $\frac{d^2 u}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} u = 0 \Rightarrow u = C \rho^{\lambda}$

$$\Rightarrow \lambda(\lambda-1) C \rho^{\lambda-2} - l(l+1) C \rho^{\lambda-2} = 0 \Rightarrow \lambda(\lambda-1) = l(l+1)$$

$$\lambda_1 = l+1; \quad \lambda_2 = -l \rightarrow \text{б.о. решение}$$

$$\rightarrow u = v(\rho) e^{-\rho} \rho^{l+1}$$

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} = v' e^{-\rho} \rho^{l+1} - v e^{-\rho} \rho^{l+1} + (l+1) v e^{-\rho} \rho^l =$$

$$= e^{-\rho} (v' \rho^{l+1} - v \rho^{l+1} + (l+1) v \rho^l)$$

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} = -e^{-\rho} (v' \rho^{l+1} - v \rho^{l+1} + (l+1) v \rho^l) + e^{-\rho} (v'' \rho^{l+1} + (l+1) v' \rho -$$

$$- v' \rho^{l+1} - (l+1) v \rho^l + (l+1) v' \rho^l + (l+1) l v \rho^{l-1}) =$$

$$= e^{-\rho} (-v' \rho^{l+1} + v \rho^{l+1} - (l+1) v \rho^l + v'' \rho^{l+1} + (l+1) v' \rho - v' \rho^{l+1} - (l+1) v \rho^l +$$

$$+ (l+1) v' \rho^l + (l+1) l v \rho^{l-1})$$

$$\rho V'' + V'[-2\rho + 2l + 2] + V[-2l - 2] + \rho_0 V = 0$$

$$V(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} C_j \rho^j$$

$$\rightarrow \bar{j} \rightarrow j+1$$

$$\rho \cdot \sum_{j=0}^{\infty} j(j-1) C_j \rho^{j-2} + [-2\rho + 2l + 2] \sum_{j=0}^{\infty} j C_j \rho^{j-1} + [\rho_0 - 2l - 2] \sum_{j=0}^{\infty} C_j \rho^j = 0$$

$$\rho \sum_{j=0}^{\infty} j(j+1) C_{j+1} \rho^{j-1} + [-2\rho + 2l + 2] \sum_{j=0}^{\infty} (j+1) C_{j+1} \rho^j + [\rho_0 - 2l - 2] \sum_{j=0}^{\infty} C_j \rho^j = 0$$

→ берем пер. степенью j :

$$j(j+1)C_{j+1} + 2C_{j+1}(j+1)(l+1) - 2C_j j + C_j(-2l-2+\rho_0) = 0$$

$$\Rightarrow C_{j+1}[j(j+1) + 2(l+1)(j+1)] + C_j(-2j-2l-2+\rho_0) = 0$$

⇒ Рекуррентное соотношение:

$$C_{j+1} = -\frac{C_j(-2j-2l-2+\rho_0)}{(j+1)(j+2(l+1))}$$

Ряд должен обрываться: $2j+2l+2 = \rho_0 \Rightarrow \rho_0 = 2n$ должно быть целым.

$$\rho_0 = \frac{\tilde{E}^2 m}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2} ; \alpha = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} \Rightarrow E_n = -\left[\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{\tilde{E}^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\right] \cdot \frac{1}{n^2} = -\frac{E_1}{n^2}$$

Общие решения $V(\rho)$ выражаются через полиномы Лагерра.

Вобщем мы выбрали 3 к.в. числа: n, m и l , но здесь всего одно n -главное квантовое число, тогда по l и m - вырождение.

18. В пространстве вектора можно выбирать с.л. так, что $\vec{e}_0 \parallel \vec{n}$.
Нужно понять:

7

$$\psi(r, \varphi + \alpha, z) = \hat{R}(\alpha) \psi(r, \varphi, z) \leftarrow \text{оператор в квант. м.к.}$$

α - мал - в разг. Тейлора:

$$\psi(r, \varphi + \delta\alpha, z) \approx \psi(r, \varphi, z) + \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \bigg|_{\delta\alpha=0} \cdot \delta\alpha + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \bigg|_{\delta\alpha=0} \delta\alpha^2 + \dots$$

Формально весь разг. повторяется, вынесем как оператор:

$$\psi(r, \varphi + \delta\alpha, z) = \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{\partial^n}{\partial \varphi^n} \delta\alpha^n \right] \psi(r, \varphi, z) = \left\{ f(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{\partial^n}{\partial \varphi^n} \hat{A}^n \right\} =$$

$$= e^{\delta\alpha \frac{\partial}{\partial \varphi}} \psi(r, \varphi, z)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \Rightarrow e^{-i\hbar \delta\alpha \frac{\partial}{\partial \varphi}} = e^{i \frac{\hat{L}_z}{\hbar} \delta\alpha}$$

$$\Rightarrow \hat{R}(\delta\varphi) = e^{i \frac{\hat{L}_z}{\hbar} \delta\varphi} \leftarrow \text{поворот углов вектора фазового с.л.}$$

19. При вырождении одному собственному значению ϵ_0 несколько собств. функций. Т.е. у нас есть вырожденные уровни $E_n^{(0)}$, т.е. м.д.

$$E_n^{(0)} = E_{n_1}^{(0)} = E_{n_2}^{(0)} \rightarrow \psi_{n_1}^{(0)}(x), \psi_{n_2}^{(0)}(x)$$

Решим $\rightarrow$ суперпозиция:

$$\psi = a_1 \psi_{n_1}^{(0)}(x) + a_2 \psi_{n_2}^{(0)}(x)$$

Если в случае, когда не было вырождения

$$(\hat{H}_0 + \hat{V})\psi = E\psi \Rightarrow \sum_m C_m (\hat{E}_m^{(0)} + V) \psi_m^{(0)} = \sum_m C_m E \psi_m^{(0)} \quad | \cdot \langle \psi_k^{(0)} | \rightarrow \int$$

$$\Rightarrow (E - E_k^{(0)}) C_k = \sum_m \hat{V}_{km} C_m$$

$$E = E^{(0)} + E^{(1)} \quad C_m = C_m^{(0)} + C_m^{(1)} \quad \text{для } k=n. \Rightarrow \underline{E_n^{(1)} = V_{nn}}$$

То теперь одному и тому же значению энергии:

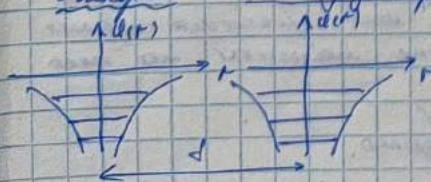
$$(E_n^{(0)} - E) C_n^{(0)} + \sum_{n'} V_{nn'} C_{n'}^{(0)} = 0 \quad n' \sim \text{кол-во уровней с энергией, соответствующей}$$

$$-E_n^{(1)} C_n^{(0)} + \sum_{n'} V_{nn'} C_{n'}^{(0)} = 0 \rightarrow \Delta = 0$$

$$\text{проблема вырождения 2: } \begin{pmatrix} -E^{(1)} + V_{11} & V_{12} \\ V_{21} & -E^{(1)} + V_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \det(\hat{V} - E^{(1)} \hat{I}) = 0$$

$\Rightarrow$ Если учесть возмущение + вырождение учитывается. С. и с. находятся как собств. вектора для матрицы соответствующих ячеек.

Электрон в поле двух протонов. H_2^+



Т.е. фазовый процесс можно считать только $\vec{r}$ в поле двух протонов:

$$\left[\frac{\vec{p}^2}{2m} + U(\vec{r} - \vec{r}_1) + U(\vec{r} - \vec{r}_2) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

$$\psi(\vec{r}) = C_1 \psi_0(\vec{r} - \vec{r}_1) + C_2 \psi_0(\vec{r} - \vec{r}_2)$$

Если ядра далеко ($r \rightarrow \infty$), то по сути имеем две 2-х уровневые системы

$$\left[\frac{p^2}{2m} + u(\vec{r}-\vec{r}_1) + u(\vec{r}-\vec{r}_2) \right] (c_1 \psi_0(\vec{r}-\vec{r}_1) + c_2 \psi_0(\vec{r}-\vec{r}_2)) = E (c_1 \psi_0(\vec{r}-\vec{r}_1) + c_2 \psi_0(\vec{r}-\vec{r}_2))$$
 действующим как будто невозмущено (на самом деле)

$$E_0 c_1 \psi_0(\vec{r}-\vec{r}_1) + u(\vec{r}-\vec{r}_2) c_1 \psi_0(\vec{r}-\vec{r}_1) + u(\vec{r}-\vec{r}_1) c_2 \psi_0(\vec{r}-\vec{r}_2) + E_0 c_2 \psi_0(\vec{r}-\vec{r}_2) =$$

$$= E [c_1 \psi_0(\vec{r}-\vec{r}_1) + c_2 \psi_0(\vec{r}-\vec{r}_2)] \quad / \cdot \int \psi_0(\vec{r}-\vec{r}_1) d^3r \quad / \cdot \int \psi_0(\vec{r}-\vec{r}_2) d^3r$$

$$\int \psi_0(\vec{r}-\vec{r}_1) \psi_0(\vec{r}-\vec{r}_1) d^3r = 1 \leftarrow \text{из нормировки}$$

$$\int \psi_0(\vec{r}-\vec{r}_1) \psi_0(\vec{r}-\vec{r}_1) u(\vec{r}-\vec{r}_2) d^3r = S$$

$$\int \psi_0(\vec{r}-\vec{r}_2) \psi_0(\vec{r}-\vec{r}_1) u(\vec{r}-\vec{r}_1) d^3r = T$$

$$\int \psi_0(\vec{r}-\vec{r}_1) \psi_0(\vec{r}-\vec{r}_2) d^3r = R$$

$$\Rightarrow E_0 c_1 + S c_2 + E_0 R c_2 + T c_1 = E c_1 + E R c_2$$

Просто числа (называются амплитудами перекрытия)

$$\vec{r}_{1,2} \rightarrow \infty \Rightarrow S, T, R \rightarrow 0$$

Докажем, что $\int \psi_0(\vec{r}-\vec{r}_2)$ все будет симметрично $1 \leftrightarrow 2$

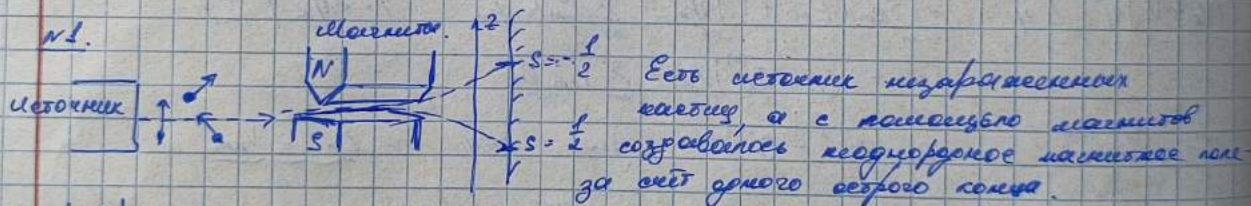
$$E_0 c_2 + S c_2 + E_0 R c_1 + T c_1 = E c_2 + E R c_2$$

$$\Rightarrow \begin{cases} c_1 (E_0 + S - E) + c_2 ((E_0 - E) R + T) = 0 \\ c_1 ((E_0 - E) R + T) + c_2 (E_0 - E + S) = 0 \end{cases} \quad E - E_0 = \varepsilon$$

$$\det = \begin{vmatrix} -\varepsilon + S & -\varepsilon R + T \\ -\varepsilon R + T & -\varepsilon + S \end{vmatrix} = (S - \varepsilon)^2 - (T - \varepsilon R)^2 = 0 \rightarrow (S - \varepsilon)^2 = (T - \varepsilon R)^2$$

$$\Rightarrow \varepsilon = S \pm |T - \varepsilon R| \approx S \pm |T| \quad \text{собств. ветви} \rightarrow \text{привести } \varepsilon = S + T$$

$c_1, c_2 \leftarrow \varepsilon = S - T$



Частица заряженная движется в магнитном поле представляется из себя магнитик $\rightarrow$ магнитный диполь, можно представить как артефакт ток.

Каждую частицу будет действовать сила:

$$U = -(\vec{\mu}, \vec{B}) \quad ; \quad \vec{\mu} \sim \text{магнитный момент}$$

Магнитный момент связан со спином $\rightarrow$ Дирак:

$$\vec{\mu} = \frac{e \hbar}{2 m c} g \vec{S} \quad g\text{-фактор}$$

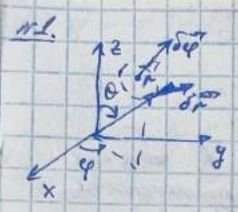
Например, для электрона μ_B (магнетон Бора) для него проекция спина μ_B как $\pm \frac{1}{2}$ и $-\frac{1}{2}$ ($S_z = \pm \frac{1}{2}$). Тогда сила магнитного поля будет действовать сила:

$$\vec{F} = -\nabla U \approx (\vec{\mu}, \nabla) \vec{B} \quad \text{если поле неоднородно}$$

Если в классике мы говорим, что магнитик намагничен, то на экране была бы сплошная картина. А в квантовой механике $\rightarrow$ наблюдаем 2 полосы.

Роторически преобраз - измеренное проективно спина на ось z.

$$(\mu_z \cdot \vec{z}_0) \left(\frac{\partial}{\partial x} \vec{x}_0 + \frac{\partial}{\partial y} \vec{y}_0 + \frac{\partial}{\partial z} \vec{z}_0 \right) \cdot \vec{B}_z \cdot \vec{z}_0 = \mu_z \cdot \frac{\partial B_z}{\partial z} \cdot \vec{z}_0 = -\mu_z \frac{\partial A}{\partial z} \cdot \vec{z}_0$$



кал ввормли оператор поворота:
 $\delta \vec{r} = \vec{n} \delta \varphi$; $\delta \vec{r} = [\delta \varphi \times \vec{r}]$

$$\psi(\vec{r} + \delta \vec{r}) = \psi(\vec{r}) + \delta \vec{r} \cdot \nabla \psi(\vec{r}) = (1 + \delta \vec{r} \cdot \nabla) \psi(\vec{r}) = \left(1 + [\delta \varphi \times \vec{r}] \cdot \nabla \right) \psi$$

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

$\Rightarrow \hat{L} \delta \varphi = \frac{i}{\hbar} \delta \varphi \hat{L}$ оператор малого поворота

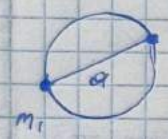
И ввормли: $\hat{L} = \hbar \vec{L}$, где $\vec{L}$ - орбитальный момент.

Для малого поворота вокруг оси z:

$$f(\varphi + \delta \varphi) \approx f(\varphi) + \delta \varphi \frac{\partial f}{\partial \varphi} = (1 + \delta \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi}) f(\varphi) = \left(1 + i \delta \varphi \frac{\hat{L}_z}{\hbar} \right) f$$

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

Ротатор можно рассматривать как вращение окн. оси z:



$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ - приведенная масса

$$\hat{H} \psi(\varphi) = E \psi(\varphi), \text{ где } \hat{H} = \frac{\hat{L}_z^2}{2I}$$

Общ. ф-ла $\hat{L}_z$:

$$\frac{\partial f}{\partial \varphi} = \frac{i\lambda}{\hbar} f(\varphi) \Rightarrow f(\varphi) = C_1 e^{i\lambda \varphi}$$

или $f(\varphi) = f(\varphi + 2\pi)$

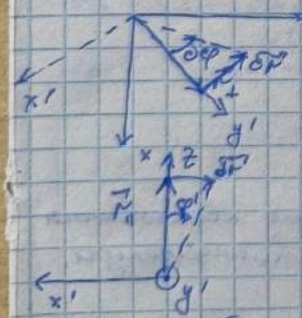
Нормировка: $C_1 \int_0^{2\pi} e^{i\lambda \varphi} e^{-i\lambda \varphi} d\varphi = 1 \Rightarrow C_1 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$

$$\Rightarrow f(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\lambda \varphi}$$

Подставим в ф-лу Шредингера:

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} - 2IE \psi = 0 \Rightarrow \hbar^2 \frac{m^2}{2I} e^{i\lambda \varphi} - 2IE \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\lambda \varphi} = 0 \Rightarrow E = \frac{\hbar^2 m^2}{2I}$$

Как получаются другие операторы? Рассмотрим вращение, поворота окн. Если представить поворот окн. оси x' , то будет иметься только угол θ .



$$\hat{L}_{x'} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \theta} \rightarrow e^{i\theta \hat{L}_{x'}/\hbar} \text{ т.к. угол поворота по "повороту"}$$

Если вращать относительно y' , то из рисунка:

$$\begin{aligned} \sin \theta \delta \varphi \approx \delta \varphi = \frac{\delta r}{r} &\Rightarrow \delta r = r \sin \theta \delta \varphi \\ \sin \theta \delta \varphi' \approx \delta \varphi' = \frac{\delta r}{r} &\Rightarrow \delta r = r \cos \theta \delta \varphi' \end{aligned} \Rightarrow \delta \varphi' = \tan \theta \cdot \delta \varphi$$

$$\hat{L}_{y'} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \theta'} = i\hbar \tan \theta \frac{\partial}{\partial \theta}$$

Наконец преобразовываем кал поворот координат:

$$\begin{cases} x = x' \sin \varphi + y' \cos \varphi \\ y = -x' \cos \varphi + y' \sin \varphi \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \hat{L}_x = \hat{L}_{x'} \sin \varphi + \hat{L}_{y'} \cos \varphi \\ \hat{L}_y = -\hat{L}_{x'} \cos \varphi + \hat{L}_{y'} \sin \varphi \end{cases}$$

$$\Rightarrow \hat{L}_x = i\hbar \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + i\hbar \cos \varphi \tan \theta \frac{\partial}{\partial \theta} ; \hat{L}_y = -i\hbar \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + i\hbar \sin \varphi \tan \theta \frac{\partial}{\partial \theta}$$

н2. Квазиклассическое приближение вдали от:

$$\hat{H}\psi = E\psi \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + [E - U(x)]\psi = 0 \rightarrow \psi''(x) + \kappa^2(x)\psi(x) = 0$$

где $\kappa(x)$ — некоторая ф-я, описывающая потенциальную энергию и в общем случае может зависеть от $\hbar$. Мы рассмотрим, но если ф-я не зависит от $\hbar$, то можно использовать метод ВКБ:

$$\psi = A(x) e^{i\theta(x)}$$

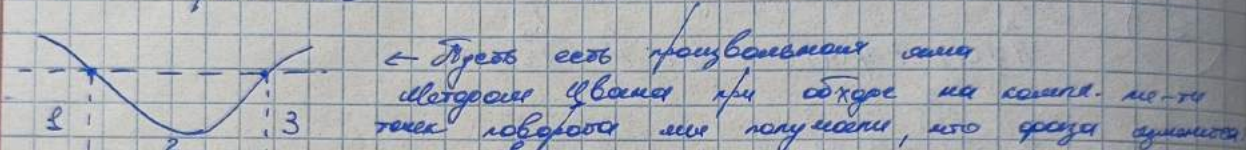
$$\psi' = (A' + i\theta' A) e^{i\theta}; \quad \psi'' = (A'' + i\theta'' A + i\theta' A') e^{i\theta} + i\theta' (A' + i\theta' A) e^{i\theta}$$

$$\Rightarrow A'' + 2i\theta' A' + i\theta'' A - (\theta')^2 A + \kappa^2(x) A = 0 \rightarrow \text{Re и Im}$$

$$\begin{cases} A'' + (\kappa^2 - \theta'^2) A = 0 \\ 2\theta' A' = \theta'' A = 0 \end{cases} \text{ предп. } A'' \text{ мало} \Rightarrow \theta' = \pm \kappa(x)$$

$$\text{В КРО: } \psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{\kappa}} e^{i \int \kappa dx} + \frac{C_2}{\sqrt{\kappa}} e^{-i \int \kappa dx}$$

$$\text{В КЗО: } \psi(x) = \frac{d_1}{\sqrt{\kappa}} e^{-i \int \kappa dx} + \frac{d_2}{\sqrt{\kappa}} e^{-i \int \kappa dx}$$



$$\begin{aligned} \text{справа} \rightarrow \frac{d_1}{\sqrt{\kappa}} e^{-i \int \kappa dx} &\rightarrow \frac{d_1}{\sqrt{\kappa}} \cos \left[\int \kappa dx - \frac{\pi}{4} \right] \\ \text{слева} \rightarrow \frac{d_2}{\sqrt{\kappa}} e^{-i \int \kappa dx} &\rightarrow \frac{d_2}{\sqrt{\kappa}} \cos \left[\int \kappa dx - \frac{\pi}{4} \right] \end{aligned}$$

Но в области КРО должна быть одна и та же ф-я:

$$d_1 \cos \left[\int \kappa dx - \frac{\pi}{4} \right] = d_2 \cos \left[\int \kappa dx - \frac{\pi}{4} \right]$$

$$\int \kappa dx = \int_a^x \kappa dx + \int_x^a \kappa dx = \int_a^x \kappa dx - \int_x^a \kappa dx \quad \text{и пусть } \int_a^x \kappa dx = \varphi_1$$

$$\Rightarrow d_1 \cos \left[\int_a^x \kappa dx - \varphi_1 - \frac{\pi}{4} \right] = d_2 \cos \left[\varphi_1 - \frac{\pi}{4} \right]$$

$$\Rightarrow d_1 \cos \left[\int_a^x \kappa dx - \varphi_2 - \frac{\pi}{4} \right] = d_2 \cos \varphi_2$$

$$\Rightarrow \begin{cases} d_1 = d_2 \\ \int_a^x \kappa dx - \frac{\pi}{4} = 2\pi n \end{cases}$$

$$\begin{cases} d_1 = -d_2 \\ \int_a^x \kappa dx - \frac{\pi}{4} = \pi n \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} d_1 = d_2 (-1)^n \\ \int_a^x \kappa dx = \pi(n + \frac{1}{4}) \end{cases}$$

→ правило квантования Бора-Зоммерфельда.

⇒ спектр в яме будет дискретным.

н3. Для гармонического осциллятора:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \rightarrow E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

Если двумерный осциллятор:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{m\omega^2}{2} (x^2 + y^2) \rightarrow \text{используем аналог для гармонического осциллятора}$$

$$E_{n_x, n_y} = \hbar\omega \left(n_x + \frac{1}{2} + n_y + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(1 + n_x + n_y \right) \rightarrow \begin{matrix} n_x=0 \\ n_y=1 \end{matrix} \quad \begin{matrix} n_x=1 \\ n_y=0 \end{matrix}$$

Если у нас есть 2 в.р.

$$\hat{H}_0 |\psi_\alpha\rangle = E_0 |\psi_\alpha\rangle; \quad \hat{H}_0 |\psi_\beta\rangle = E_0 |\psi_\beta\rangle \quad \text{и функции } \psi = c_\alpha |\psi_\alpha\rangle + c_\beta |\psi_\beta\rangle$$

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

$$\Rightarrow (\hat{H}_0 + \hat{V}) (c_\alpha |\psi_\alpha\rangle + c_\beta |\psi_\beta\rangle) = E (c_\alpha |\psi_\alpha\rangle + c_\beta |\psi_\beta\rangle) \quad \cdot \langle \psi_\alpha |$$

$$c_\alpha \sqrt{E_0} + c_\alpha \langle \psi_\alpha | \hat{V} | \psi_\alpha \rangle + c_\beta \langle \psi_\alpha | \hat{V} | \psi_\beta \rangle = E c_\alpha = E_0 c_\alpha + E^{(1)} c_\alpha$$

Если поменять $\alpha \leftrightarrow \beta$:

$$c_\beta \sqrt{E_0} + c_\beta \langle \psi_\beta | \hat{V} | \psi_\beta \rangle + c_\alpha \langle \psi_\beta | \hat{V} | \psi_\alpha \rangle = E c_\beta = E_0 c_\beta + E^{(1)} c_\beta$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} V_{\alpha\alpha} & V_{\alpha\beta} \\ V_{\beta\alpha} & V_{\beta\beta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_\alpha \\ c_\beta \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} E^{(1)} & 0 \\ 0 & E^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_\alpha \\ c_\beta \end{pmatrix} = 0$$

В нашей задаче: $\psi(x, y) = \psi_{n_x}(x) \psi_{n_y}(y)$

Введем операторы рождения и уничтожения $\hat{a}_x; \hat{a}_x^\dagger; \hat{a}_y; \hat{a}_y^\dagger$

$$\left(\begin{matrix} \hat{x} = \frac{\alpha + \alpha^\dagger}{\sqrt{2}} \\ \hat{y} = \frac{\alpha_y + \alpha_y^\dagger}{\sqrt{2}} \end{matrix} ; \begin{matrix} \hat{p}_x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \left(\frac{\alpha - \alpha^\dagger}{i\sqrt{2}} \right) \\ \hat{p}_y = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \left(\frac{\alpha_y - \alpha_y^\dagger}{i\sqrt{2}} \right) \end{matrix} \right)$$

$$\hat{H}_0 = \hbar\omega \left[\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + \hat{a}_y^\dagger \hat{a}_y + 1 \right]$$

$$V = \alpha x y = \frac{\alpha \hbar}{2m\omega} (\hat{a}_x + \hat{a}_x^\dagger) (\hat{a}_y + \hat{a}_y^\dagger)$$

$$V_{11} = \langle 1, 0 | \frac{\alpha \hbar}{2m\omega} (\hat{a}_x + \hat{a}_x^\dagger) (\hat{a}_y + \hat{a}_y^\dagger) | 1, 0 \rangle = 0$$

$$= \frac{\alpha \hbar}{2m\omega} \langle 1, 0 | \hat{a}_x \hat{a}_y + \hat{a}_x \hat{a}_y^\dagger + \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y + \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y^\dagger | 1, 0 \rangle = 0$$

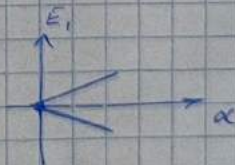
аналогично $V_{22} = 0$

$$V_{12} = \langle 1, 0 | \frac{\alpha \hbar}{2m\omega} (\hat{a}_x + \hat{a}_x^\dagger) (\hat{a}_y + \hat{a}_y^\dagger) | 0, 1 \rangle = \langle 1, 0 | \frac{\alpha \hbar}{2m\omega} \hat{a}_x^\dagger | 0, 0 \rangle = \frac{\alpha \hbar}{2m\omega}$$

$$V_{21} = \langle 0, 1 | \frac{\alpha \hbar}{2m\omega} (\hat{a}_x + \hat{a}_x^\dagger) (\hat{a}_y + \hat{a}_y^\dagger) | 1, 0 \rangle = \frac{\alpha \hbar}{2m\omega}$$

$$\Rightarrow (-E_1^{(1)})^2 - \left(\frac{\alpha \hbar}{2m\omega} \right)^2 = 0 \Rightarrow E_1^{(1)} = \pm \frac{\alpha \hbar}{2m\omega}$$

и разделим.



н.л. Спин - "вращение". Если имеем обобщенную в.ф. $\psi(\vec{r})$, то

вращение вводим как:

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

$$\psi(\vec{r} + \delta\vec{r}) = \psi(\vec{r}) + \delta\vec{r} \cdot \nabla \psi(\vec{r}) = [1 + ([\delta\vec{\varphi} \times \vec{r}] \cdot \nabla)] \psi(\vec{r})$$

$$\Rightarrow R = [1 + i(\delta\vec{\varphi}, \vec{L})] \quad \text{где } \vec{L} = [\vec{r} \times \vec{p}] - \text{угловой момент}$$

А если $\psi(\vec{r})$ - в.ф. будет многокомпонентной, то спин - это как внутренняя степень свободы. И если перейти в с.л., где масса покоится:

$$R = [1 + i(\delta\vec{\varphi}, \vec{S})], \quad \psi_s(\vec{r}) = \psi(\vec{r}) \vec{s}$$

А полный момент: $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$

Перемешанные $\psi_1, \psi_2, \psi_3 \dots$ называют спинорными компонентами:

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \text{ и т.д. } \sim \text{в.ф. могут быть сложены}$$

Примем если оператор спина вводится через коммутацию соотношения спина L, J, S - подобными: $\Rightarrow$ они все коммутируют между собой

$$S_x S_y - S_y S_x = i S_z; \quad S_{\pm} = S_x \pm i S_y$$

$$[S_+, S_-] = 2 S_z; \quad [S_z, S_{\pm}] = \pm S_{\pm}$$

Можно показать, что для любых и любых операторов

$$\langle S, \vec{r} - 1 | S_- | S, \vec{r} \rangle = \langle S, \vec{r} | S_+ | S, \vec{r} - 1 \rangle = \sqrt{(S + \vec{r})(S - \vec{r} + 1)}$$

где $S, \vec{r}$ - собственные числа:

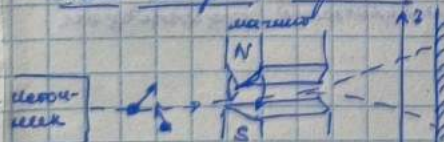
$$\hat{S}_z | S, \vec{r} \rangle = \vec{r} | S, \vec{r} \rangle; \quad \hat{S}^2 | S, \vec{r} \rangle = S(S + 1) | S, \vec{r} \rangle$$

Примем также $\vec{r}$ - ограничена сверху и снизу: $\vec{r}_{\max} = \max S, (\vec{r} = -S, \dots, S)$
 $\Rightarrow 2S = \vec{r}$ должно быть целым $\Rightarrow$ спин и.б. полуцелый.

$$S = \frac{1}{2}: \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} \Rightarrow S_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; S_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \rightarrow \text{из них } \hat{S}_z, \hat{S}_x, \hat{S}_y$$

$$\hat{S}_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad \hat{S}_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{S}_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Эффект Штерна-Герлаха:

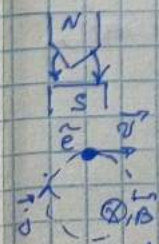


Есть источник незаряженных частиц, с магнитным моментом взаимодействует неоднородное сильное магнитное поле (за счет этого лопатки). Конечная заряженная частица в магнитном поле взаимодействует из себя магнитный момент (можно представить как крошечный ток).

На частицу будет действовать сила: $\vec{U} = -(\vec{\mu}, \vec{B})$

$$\vec{F} = -\nabla U = (\vec{\mu}, \nabla) \vec{B}, \quad \text{а магнитный момент связан со спином}$$

$$\vec{\mu} = \frac{e\hbar}{2mc} g \vec{S}$$



Классифицирует легит. электрон, мы знаем для него проекция спина и.б. $S_z = \pm \frac{1}{2}$. Тогда при действии этого поля $\vec{B}$ с разницей спина будут отклоняться в разные стороны.

Рассмотрим пробит азирект проекцало спина на ось z.

№2. В азирект козр не брало вырождениа и спина поправку к n-й азирект:

$$(\hat{H}_0 + \hat{V})\psi = E\psi \rightarrow \sum_m C_m (E_m^{(0)} + V) \psi_m^{(0)} = \sum_m C_m E \psi_m^{(0)} \quad | \cdot \langle \psi_n^{(0)} | + \rangle$$

$$\Rightarrow (E - E_n^{(0)}) C_n = \sum_m \hat{V}_{nm} C_m$$

$$E = E^{(0)} + E^{(1)} \quad \text{и} \quad C_n = C_n^{(0)} + C_n^{(1)} \quad \text{для} \quad k=n. \Rightarrow E_n^{(1)} = \hat{V}_{nn}.$$

При вырождении допому собственному значению соотв. несколько собств. ф-ий - б.е. у нас есть вырожденные $E_n^{(0)}$:

$$E_n^{(0)} = E_{n_1}^{(0)} = E_{n_2}^{(0)} \rightarrow \psi_{n_1}^{(0)}(x), \psi_{n_2}^{(0)}(x)$$

Решение $\rightarrow$ суперпозиция: $\psi = a_1 \psi_{n_1}^{(0)}(x) + a_2 \psi_{n_2}^{(0)}(x)$

$$\Rightarrow (E_n^{(0)} - E) C_n^{(0)} + \sum_{n'} \hat{V}_{nn'} C_{n'}^{(0)} = 0 \quad n' \sim \text{кол-во уровней с ф.и.м. составляющих.}$$

$$\Rightarrow -E_n^{(1)} C_n^{(0)} + \sum_{n'} \hat{V}_{nn'} C_{n'}^{(0)} = 0 \Rightarrow \Delta = 0 \Rightarrow \det(\hat{V} - E^{(1)} \hat{I}) = 0$$

~ и есть собственное ф-е

Если учесть возмущение $\rightarrow$ вырождение снимается $\rightarrow C_1$ и C_2 находятся как собственные вектора для собств. чисел. и можно найти деловые

$$\psi_1^+ = C_1^+ \psi_1^{(0)} + C_2^+ \psi_2^{(0)}$$

$$\psi_1^- = C_1^- \psi_1^{(0)} + C_2^- \psi_2^{(0)}$$

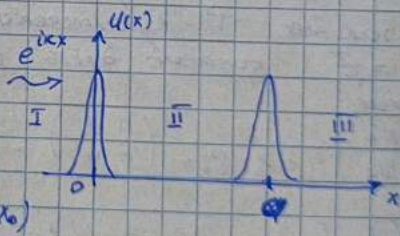
~ правильные ф-ии нулевого приближения

№3. $U(x) = \alpha [\delta(x) + \delta(x+\alpha)]$

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

Где δ -ф-ия:

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_{x=x_0+\epsilon} - \left. \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_{x=x_0-\epsilon} = + \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(x_0)$$



I: при $x < 0$: $\psi_k(x) \sim e^{ikx}$

II: $0 < x < \alpha \rightarrow$ в ограниченной области спектр дискретный, осциллирующий.
 $\psi_k(x) \sim A \sin kx + B \cos kx$

III: при $x > \alpha$: $\psi_k(x) = C e^{ik(x-\alpha)}$

По условию нужно найти такие E, что ограниченной величины нет, поэтому в I только решение с возрастающей величиной.

I: $\frac{\partial \psi_k}{\partial x} = ik e^{ikx}$

II: $\frac{\partial \psi_k}{\partial x} = kA \cos kx - kB \sin kx$

III: $\frac{\partial \psi_k}{\partial x} = C ik e^{ik(x-\alpha)}$

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$$

$$\psi_{II}(\alpha) = \psi_{III}(\alpha)$$

$$\begin{cases} B = 1 \\ C = A \sin k\alpha + \cos k\alpha \end{cases}$$

$$B = 1$$

$$C = A \sin \kappa a + B \cos \kappa a \rightarrow C = A \sin \kappa a + \cos \kappa a$$

$$\kappa A - i\kappa = + \frac{2m\alpha}{\hbar^2}$$

$$i\kappa C - \kappa A \cos \kappa a + \kappa B \sin \kappa a = + \frac{2m\alpha}{\hbar^2} C$$

$$i\kappa (A \sin \kappa a + \cos \kappa a) - \kappa A \cos \kappa a + \kappa \sin \kappa a = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} (A \sin \kappa a + \cos \kappa a)$$

$$i\kappa A \sin \kappa a + i\kappa \cos \kappa a - \kappa A \cos \kappa a + \kappa \sin \kappa a = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} (A \sin \kappa a + \cos \kappa a)$$

$$\kappa A = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} + i\kappa \rightarrow A = \frac{2m\alpha}{\hbar^2 \kappa} + i \quad \text{unphysikalisch}$$

$$(i\kappa \sin \kappa a - \kappa \cos \kappa a - \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \sin \kappa a) A = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \cos \kappa a - i\kappa \cos \kappa a - \kappa \sin \kappa a$$

$$(i\kappa \sin \kappa a - \kappa \cos \kappa a - \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \sin \kappa a) \left(\frac{2m\alpha}{\hbar^2 \kappa} + i \right) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \cos \kappa a - i\kappa \cos \kappa a - \kappa \sin \kappa a$$

$$\frac{2m\alpha}{\hbar^2} i \sin \kappa a - \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \cos \kappa a - \frac{4m^2 \alpha^2}{\hbar^4 \kappa} \sin \kappa a - \kappa \sin \kappa a - i\kappa \cos \kappa a - i \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \sin \kappa a =$$

$$= \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \cos \kappa a - i\kappa \cos \kappa a - \kappa \sin \kappa a \rightarrow \text{Re u. Im.}$$

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \cos \kappa a + \frac{4m^2 \alpha^2}{\hbar^4 \kappa} \sin \kappa a + \kappa \sin \kappa a &= \kappa \sin \kappa a - \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \cos \kappa a \quad / : \cos \kappa a \\ \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \sin \kappa a - \kappa \cos \kappa a - \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \sin \kappa a &= -\kappa \cos \kappa a \Rightarrow 0=0 \end{aligned} \right.$$

$$\frac{2m\alpha}{\hbar^2} + \frac{4m^2 \alpha^2}{\hbar^4 \kappa} \tan \kappa a = - \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \Rightarrow \frac{4m^2 \alpha^2}{\hbar^4 \kappa} \tan \kappa a = - \frac{4m\alpha}{\hbar^2} \quad / : \frac{4m^2 \alpha^2}{\hbar^4}$$

$$\Rightarrow \tan \kappa a = - \frac{\kappa \hbar^2}{m\alpha}$$

$$\psi(0) = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

① Возмемся на бесконечно малое вращение вокруг оси:

10

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

$$\psi(\vec{r} + \delta \vec{r}) = \psi(\vec{r}) + \delta \vec{r} \cdot \nabla \psi(\vec{r}) = (1 + \delta \vec{r} \cdot \nabla) \psi(\vec{r}) = \{1 + ([\delta \vec{\varphi} \times \vec{r}] \cdot \nabla)\} \psi(\vec{r})$$

$$\Rightarrow \hat{R} = [1 + i(\delta \vec{\varphi} \cdot \vec{L})] \Rightarrow \hat{R} = [1 + i(\delta \vec{\varphi} \cdot \vec{S})] \sim \text{слит.}$$

Используя связь с матрицами Паули: $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$

$$\hat{R}_{\delta \varphi} = [1 + \frac{i}{2}(\delta \vec{\varphi} \cdot \vec{\sigma})] \rightarrow \text{хотим сделать вращение конкретным}$$

выберем с.к. так, что $\vec{z} = \frac{\vec{n}}{n} \parallel \delta \vec{\varphi}$

$$\hat{R}_{\delta \varphi} = [1 + \frac{i}{2} \delta \varphi \vec{\sigma}_z], \text{ новая волновая ф.-я:}$$

$$\psi' = \hat{R}_{\delta \varphi} \psi \rightarrow \psi' = (1 + \frac{i}{2} \delta \varphi \vec{\sigma}_z) \psi, \text{ матрица слит. } \frac{1}{2}:$$

$$\vec{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \Rightarrow \psi' = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \psi + \frac{i}{2} \delta \varphi \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \psi$$

$$\psi' - \psi = \frac{i}{2} \delta \varphi \vec{\sigma}_z \psi \rightarrow \frac{\psi' - \psi}{\delta \varphi} = \frac{i}{2} \vec{\sigma}_z \psi, \text{ как производная.}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = \frac{i}{2} \vec{\sigma}_z \psi \Rightarrow \frac{\partial}{\partial \varphi} \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix} = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix} \rightarrow \text{система диф. ур.}$$

$$\int \frac{\partial \psi_{\uparrow}}{\partial \varphi} = \frac{i}{2} \psi_{\uparrow} \Rightarrow \psi_{\uparrow} = \psi_{\uparrow}^0 e^{i \frac{\varphi}{2}}; \quad \psi_{\downarrow} = \psi_{\downarrow}^0 e^{-i \frac{\varphi}{2}}$$

$$\int \frac{\partial \psi_{\downarrow}}{\partial \varphi} = -\frac{i}{2} \psi_{\downarrow} \Rightarrow \psi_{\downarrow} = \psi_{\downarrow}^0 e^{-i \frac{\varphi}{2}}; \quad \text{В матричном виде: } \psi = e^{i \frac{\varphi}{2} \vec{\sigma}_z} \psi^0$$

$$\text{В естественной с.к.: } \vec{\sigma}_z \rightarrow (\vec{\sigma} \cdot \vec{n}) \\ \Rightarrow \hat{R}_{\delta \varphi} = e^{i \frac{\varphi}{2} (\vec{n} \cdot \vec{\sigma})}$$

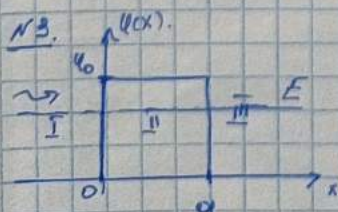
Как перейти в естественную? Из свойств матриц Паули:

$$\hat{F}(a\hat{1} + b\vec{\sigma}) = C_1 \hat{1} + C_2 (a + b\vec{\sigma}) \rightarrow \text{действием на } \psi$$

$$\hat{F} e^{i \vec{\sigma} \cdot \vec{a}} = C_1 + C_2 \vec{\sigma} \cdot \vec{a}$$

$$\begin{cases} e^{i\alpha} = C_1 + C_2 \alpha \\ e^{-i\alpha} = C_1 - C_2 \alpha \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 2C_2 \alpha = 2i \sin \alpha \\ 2C_1 = 2 \cos \alpha \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} C_2 = \frac{i \sin \alpha}{\alpha} \\ C_1 = \cos \alpha \end{cases}$$

$$\Rightarrow \hat{R}_{\delta \varphi} = \cos \frac{\varphi}{2} + i (\vec{n} \cdot \vec{\sigma}) \sin \frac{\varphi}{2}$$



$$\hat{H}\psi = E\psi, \text{ где } \hat{H} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right) \text{ Соотн. между } U(x) \text{ и } E \text{ произвольная}$$

$$\psi_k(x) = \begin{cases} e^{ikx} + A e^{-ikx}, & x < 0 \\ B e^{ikx} + C e^{-ikx}, & 0 < x < a \\ G e^{ik(x-a)}, & x > a \end{cases}$$

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}}$$

Используем условие непрерывности ф.-ий и производных:

$$\psi_k(x) = \begin{cases} i\kappa e^{i\kappa x} - i\kappa A e^{-i\kappa x}, & x < 0 \\ i\kappa B e^{i\kappa x} - i\kappa C e^{-i\kappa x}, & 0 < x < a \\ i\kappa G e^{i\kappa(x-a)}, & \end{cases}$$

$$x=0: \begin{cases} 1+A=B+C \\ i\kappa - i\kappa A = i\kappa B - i\kappa C \\ B e^{i\kappa a} + C e^{-i\kappa a} = G \\ \kappa(B e^{i\kappa a} - C e^{-i\kappa a}) = \kappa G \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} 1+A=B+C \\ \kappa(1-A) = \kappa(B-C) \\ B e^{i\kappa a} + C e^{-i\kappa a} = G \\ \kappa(B e^{i\kappa a} - C e^{-i\kappa a}) = \kappa G \end{cases}$$

нулем коэф. A и G , тогда коэф-ты отражения $R=|A|^2$ и прохождения $D=|G|^2$. Если $\kappa_0 < 0$, то этого значения $\kappa_0 \rightarrow -\kappa_0$.

$$\kappa(1-A) = \kappa B - \kappa C \rightarrow \kappa(1-A) + C = B \rightarrow 1+A = \frac{\kappa}{\kappa} (1-A) + 2C$$

$$B e^{i\kappa a} + C = G e^{i\kappa a} \rightarrow C = G e^{i\kappa a} - B e^{i\kappa a}$$

$$\kappa B e^{i\kappa a} - \kappa(G e^{i\kappa a} - B e^{i\kappa a}) = \kappa G \rightarrow 2\kappa B e^{i\kappa a} = (\kappa + \kappa) G$$

$$G = \frac{2\kappa B e^{i\kappa a}}{\kappa + \kappa}$$

$$C = \frac{2\kappa B e^{i\kappa a}}{\kappa + \kappa} - \left[\frac{\kappa}{\kappa} (1-A) + C \right] e^{i\kappa a}$$

$$C = \frac{2\kappa B e^{i\kappa a}}{\kappa + \kappa} - \frac{\kappa}{\kappa} (1-A) e^{i\kappa a} + C e^{i\kappa a}$$

$$C = \frac{2\kappa \left[\frac{\kappa}{\kappa} (1-A) + C \right] e^{i\kappa a}}{\kappa + \kappa} - \frac{\kappa}{\kappa} (1-A) e^{i\kappa a} + C e^{i\kappa a}$$

...

$$\hat{P}^2 \psi = P^2 \psi = \psi \rightarrow p = \pm 1.$$

$$\hat{P}\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r}) \rightarrow \text{ор-я четная}$$

$$\psi(\vec{r}) = -\psi(-\vec{r}) \rightarrow \text{ор-я нечетная}$$

$\hat{a} \hat{b} \rightarrow$ тоже коммутирует, т.к. произв. по коэф. тоже перемешать можно.

$$\neg \neg \neg \neg ; \quad \odot \rightarrow \pi - \odot ; \quad \varphi \rightarrow \varphi + \pi$$

Центральный вектор преобр. как $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$, $\vec{a} \rightarrow -\vec{a}$, составный вектор не меняет знака.

11. Спин - внутренняя степень свободы. И мы ввели его потому, когда говорили, что в.ф. в общем случае м.б. многозначной (аналогия с вращением).

Оператор вращений через орбитальный момент:

$$R = [1 + i(\vec{\sigma} \vec{\varphi}, \vec{L})], \quad \vec{L} = [\vec{r} \times \vec{p}], \quad \text{если преобр. в. с.о., где}$$

$$R = [1 + i(\vec{\sigma} \vec{\varphi}, \vec{S})], \quad \psi_2(\vec{r}) = \psi(\vec{r}, \vec{v})$$

наблюдается.

В квантовой механике соотношения для S_x и S_y должны быть аналогичны, т.к. они все характеризуют вращение в 3х мерном пр-ве.

$$L_x L_y - L_y L_x = i L_z \Rightarrow S_x S_y - S_y S_x = i S_z$$

$$[L^2, L_x] = 0 \Rightarrow [S^2, S_x] = 0$$

Если ввести левый и правый операторы: $S_{\pm} = S_x \pm i S_y$

$$\Rightarrow [S_z, S_{\pm}] = \pm S_{\pm}, \quad [S_x, S_{\pm}] = \mp S_y$$

$$S_+ |s, \vec{v}\rangle \sim |s, \vec{v}+1\rangle$$

$$S_- |s, \vec{v}\rangle \sim |s, \vec{v}-1\rangle$$

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

Для матричных элементов можно показать:

$$\langle s, \vec{v}-1 | S_- | s, \vec{v} \rangle = \langle s, \vec{v} | S_+ | s, \vec{v}-1 \rangle = \sqrt{(s+\vec{v})(s-\vec{v}+1)}$$

Для $s = \frac{1}{2}$ $S_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ $S_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ $\rightarrow$ через них S_x, S_y, S_z

$$\hat{S}_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{S}_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{S}_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

матрицы Паули.

Алгебра - операции умножения и сложения над объектами.

$$\hat{S}_x \hat{S}_y - \hat{S}_y \hat{S}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} = 2i \hat{S}_z$$

$$\hat{S}_x \hat{S}_y + \hat{S}_y \hat{S}_x = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = 0 \rightarrow \text{коммутируют.}$$

$$\hat{S}_x \hat{S}_y = i \hat{S}_z; \quad \hat{S}_y \hat{S}_x = -i \hat{S}_z$$

$$\text{Таким: } \hat{S}_x^2 = \hat{S}_y^2 = \hat{S}_z^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{I}$$

Это и есть правила сложения и умножения.

Что с их собств. значениями и собств. ф-ями?

$$1) \hat{S}_x \psi = \lambda \psi \Rightarrow \begin{vmatrix} -\lambda & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - \frac{1}{4} = 0 \Rightarrow \lambda_{1,2} = \pm \frac{1}{2}$$

$$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow -\psi_1 = \psi_2 \Rightarrow \psi_{x+} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \leftarrow \psi_x^2 + \psi_z^2 = 1$$

$$\psi_{x-} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$2) \hat{S}_y \psi = \lambda \psi$$

$$\begin{vmatrix} -\lambda & -\frac{1}{2}i \\ \frac{1}{2}i & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - \frac{1}{4} = 0$$

$$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}i \\ \frac{1}{2}i & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \psi_{y+} = \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\psi_{y-} = \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$3) \hat{S}_2 \psi = \lambda \psi \Rightarrow \begin{vmatrix} \frac{1}{2} - \lambda & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda = \pm \frac{1}{2}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \psi_{2+} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \psi_{2-} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$N2. \hat{H} = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \alpha x^4$$

$$\text{В случае без возмущения: } \hat{H}^{(0)} = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \Rightarrow E_n^{(0)} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

$$\text{Безразмерные величины: } l_{\text{кл}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = l_0, \quad x = \frac{x}{l_0}$$

$$\xi = \frac{x}{l_0} = \frac{a + a^\dagger}{\sqrt{2}}; \quad \frac{p}{\hbar} = \frac{p}{\hbar m \omega l_0} = \frac{a - a^\dagger}{i\sqrt{2}}$$

$$\Rightarrow \hat{V} = \tilde{\alpha} (a + a^\dagger)^4$$

$$H_0 = \left[-\frac{\hbar^2 \partial^2}{2m \partial x^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right] = \hbar\omega \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\xi^2}{2} \right) = \frac{\hbar\omega}{2} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \xi^2 \right)$$

В отсутствие возмущения получаем из станд. теории возмущений:

$$E_k = E_k^{(0)} + V_{kk} + \sum_{n \neq k} \frac{|V_{kn}|^2}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}}$$

$$\text{И используем: } a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$$

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

$$\langle k | \tilde{\beta} (a + a^\dagger)^4 | k \rangle = \langle k | \tilde{\beta} (a + a^\dagger) (a + a^\dagger) (a + a^\dagger) (a + a^\dagger) | k \rangle = \dots$$

$$= \langle k | \tilde{\beta} (aa + aa^\dagger + a^\dagger a + a^\dagger a^\dagger) (aa + aa^\dagger + a^\dagger a + a^\dagger a^\dagger) | k \rangle = \left\{ \begin{array}{l} \text{где первая } a \text{ и } a^\dagger \\ \text{дадут ненулевой вклад} \end{array} \right\}$$

$$= \tilde{\beta} \langle k | aa a^\dagger a^\dagger + a^\dagger a a a^\dagger + a^\dagger a a^\dagger a + a^\dagger a^\dagger a a | k \rangle$$

$$1) \langle k | aa a^\dagger a^\dagger | k \rangle = \sqrt{k+1} \cdot \sqrt{k+2} \cdot \sqrt{k+1} \cdot \sqrt{k+2} \langle k | k \rangle = (k+2)(k+1)$$

$$2) \langle k | aa^\dagger aa^\dagger | k \rangle = \sqrt{k+1} \cdot \sqrt{k+1} \cdot \sqrt{k+1} \cdot \sqrt{k+1} = (k+1)^2$$

$$3) \langle k | a^\dagger a a a^\dagger | k \rangle = \sqrt{k+1} \cdot \sqrt{k+1} \cdot \sqrt{k} \cdot \sqrt{k} = k(k+1)$$

$$4) \langle k | a^\dagger a^\dagger a a | k \rangle = \sqrt{k} \cdot \sqrt{k} \cdot \sqrt{k} \cdot \sqrt{k} = k^2$$

$$5) \langle k | a^\dagger a^\dagger a a | k \rangle = \sqrt{k} \cdot \sqrt{k-1} \cdot \sqrt{k-1} \cdot \sqrt{k} = k(k-1)$$

$$6) \langle k | aa^\dagger a^\dagger a | k \rangle = \sqrt{k} \cdot \sqrt{k} \cdot \sqrt{k+1} \cdot \sqrt{k+1} = k(k+1)$$

$$\sim \underbrace{k^2 + 8k + 2} + \underbrace{k^2 + 2k + 1} + \underbrace{k^2 + k + k^2 + k^2 - k + k^2 + k} = 6k^2 + 6k + 3 = 3(2k^2 + 2k + 1)$$

$$\Rightarrow E_k \approx \hbar\omega \left(k + \frac{1}{2}\right) + \tilde{\beta} \cdot 3(2k^2 + 2k + 1) \sim \text{в 1м порядке}$$

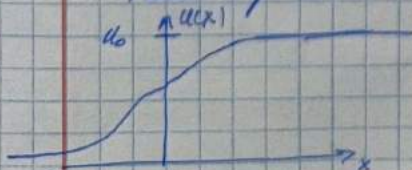
N3. (2.54)

Рассмотрим барьер в виде ступеньки: $\lim_{x \rightarrow -\infty} U(x) = 0$

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} U(x) = U_0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_k}{\partial x^2} + U(x) \psi_k(x) = E \psi_k$$

Сматриваем асимптотику: ψ_k^*



$$\psi_k(x) \propto \begin{cases} e^{ikx} + A(k)e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty \\ B(k)e^{ikx}, & x \rightarrow +\infty \end{cases}$$

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}}$$

Сформулируем закон сохранения энергии:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_k^*}{\partial x^2} + U(x) \psi_k^*(x) = E \psi_k^* \quad | \cdot \psi_k$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_k}{\partial x^2} + \psi_k^* U \psi_k = \psi_k^* E \psi_k$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi_k \frac{\partial^2 \psi_k^*}{\partial x^2} + \psi_k U \psi_k^* = \psi_k E \psi_k^*$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\psi_k^* \frac{\partial^2 \psi_k}{\partial x^2} - \psi_k \frac{\partial^2 \psi_k^*}{\partial x^2} \right) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\psi_k^* \frac{\partial \psi_k}{\partial x} - \psi_k \frac{\partial \psi_k^*}{\partial x} \right) = 0$$

$$\Rightarrow \psi_k^* \frac{\partial \psi_k}{\partial x} - \psi_k \frac{\partial \psi_k^*}{\partial x} = \text{const.}$$

$$\frac{\partial \psi_k}{\partial x} = \begin{cases} ike^{ikx} - ikAe^{-ikx} \\ ik_1 B e^{ik_1 x} \end{cases}$$

$$\frac{\partial \psi_k^*}{\partial x} = \begin{cases} -ike^{-ikx} + ikAe^{ikx} \\ -ik_1 B e^{-ik_1 x} \end{cases}$$

$$\left([e^{-ikx} + Ae^{-ikx}] \cdot [ike^{ikx} - ikAe^{-ikx}] - [e^{ikx} + Ae^{ikx}] \cdot [-ike^{-ikx} + ikAe^{ikx}] \right) =$$

$$= (ik - ikAe^{-2ikx} + ikAe^{2ikx} - ikA^2 + ik - ikAe^{2ikx} + ikAe^{-2ikx} - ikA^2) =$$

$$= 2ik - 2ikA^2$$

$$\left[\psi_k^* \frac{\partial \psi_k}{\partial x} - \psi_k \frac{\partial \psi_k^*}{\partial x} \right] = Be^{-ik_1 x} \cdot ik_1 B e^{ik_1 x} - Be^{ik_1 x} \cdot (-ik_1 B e^{-ik_1 x}) =$$

$$= ik_1 B^2 + ik_1 B^2 = 2ik_1 B^2$$

$$2ik - 2ikA^2 = 2ik_1 B^2 \quad \Rightarrow \frac{A^2}{R} + \frac{k_1}{k} \frac{B^2}{T} = 1$$

$$\Rightarrow R + T = 1$$

Сверстив закон сохранения энергии и импульса (пока без доказательства)

$$\text{div } \vec{T} + \frac{\partial \psi^2}{\partial t} = 0$$

(+1)

1. В случае когда не было вырождения в спектре перейдем к n -й энергии:

12

$$(\hat{H}_0 + \hat{V})\psi = E\psi \Rightarrow \sum_m C_m (E_m^{(0)} + V) \psi_m^{(0)} = \sum_m C_m E \psi_m^{(0)} \quad / \cdot \langle \psi_k^{(0)} | + \int$$

$$\Rightarrow (E_k^{(0)} - E) C_k + \sum_m V_{km} C_m = 0$$

и в 1 -м приближении: $E = E^{(0)} + E^{(1)}$ и $C_m = C_m^{(0)} + C_m^{(1)}$, для $k = n$.

$$\Rightarrow E_n^{(1)} = V_{nn}$$

При вырождении энергии собственному значению $E_n^{(0)}$ несколько собственных функций. Т.е. у нас есть вырождение $E_n^{(0)}$:

$$E_n^{(0)} = E_{n_1}^{(0)} = E_{n_2}^{(0)} \rightarrow \psi_{n_1}^{(0)}(x), \psi_{n_2}^{(0)}(x)$$

Решение $\rightarrow$ суперпозиция: $\psi = a_1 \psi_{n_1}^{(0)}(x) + a_2 \psi_{n_2}^{(0)}(x)$

$$\Rightarrow (E_n^{(0)} - E) C_n^{(0)} + \sum_{n'} V_{nn'} C_{n'}^{(0)} = 0 \quad n' - \text{какое-то из уровней с данной энерг.}$$

$$\Rightarrow -E_n^{(1)} C_n^{(0)} + \sum_{n'} V_{nn'} C_{n'}^{(0)} = 0 \Rightarrow \det(\hat{V} - E^{(1)} \hat{I}) = 0$$

Выводное вырождение:

$$\begin{pmatrix} E^{(0)} - E + V_{11} & V_{12} \\ V_{21} & E^{(0)} - E + V_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = 0$$

$$E^{(0)} - E \equiv -E \Rightarrow \begin{pmatrix} -E + V_{11} & V_{12} \\ V_{21} & -E + V_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \det = 0$$

$$\Rightarrow (E - V_{11})(E - V_{22}) - V_{12} V_{21} = 0$$

$$E^2 - E(V_{11} + V_{22}) + V_{11} V_{22} - V_{12} V_{21} = 0$$

$$E = \frac{V_{11} + V_{22}}{2} \pm \sqrt{\frac{V_{11}^2 + 2V_{11}V_{22} + V_{22}^2 - 4V_{11}V_{22} + 4V_{12}V_{21}}{4}} = \frac{V_{11} + V_{22}}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(V_{11} - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2}$$

Ищем собственные векторы:

$$(-E + V_{11}) C_1 + V_{12} C_2 = 0 \rightarrow C_2 = C_1 \cdot \frac{E - V_{11}}{V_{12}}$$

$$C_2^+ = \frac{C_1}{V_{12}} \left[\frac{V_{22} - V_{11}}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{(V_{11} - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2} \right]$$

$$C_2^- = \frac{C_1}{V_{12}} \left[\frac{V_{22} - V_{11}}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{(V_{11} - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2} \right]$$

$$\Rightarrow 1) \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_{12} \\ \frac{V_{22} - V_{11}}{2} - \dots \end{pmatrix} \quad 2) \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_{12} \\ \dots \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \psi = C_1^{(0)} \psi_1^{(0)} + C_2^{(0)} \psi_2^{(0)} \quad \text{нормировка по-н. нулевой функц.}$$

Случаю вырождения уровня рассмотрен.

1.2. Спин - "вращение" - внутр. степень свободы. Мы ввели его понятие, когда говорили про в.ф. в общем случае ш.б. многокомпонентной (аналогично с векторами)

Оператор вращения $\hat{L}$ через канонический момент:

$$\psi(\vec{r} + \delta \vec{r}) \approx \psi(\vec{r}) + \delta \vec{r} \cdot \nabla \psi = \left(1 + \delta \vec{r} \cdot \nabla \right) \psi$$

$$\Rightarrow R = [1 + i(\vec{\sigma} \vec{r}, \vec{e})], \quad \vec{e} = [\vec{r} \times \vec{k} \vec{k}].$$

Если перейти в с.о., где касущая плоскость (но может вращаться);

$$R = [1 + i(\vec{\sigma} \vec{r}, \vec{e})], \quad \psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r}, \vec{v}) \sim \text{спин.}$$

Т.к. $\vec{S}$ и $\vec{L}$ характеризуют вращение в 3х-мерном пр-ве, то каноническому S_x и L_x соответствуют те же канонические соотношения:

$$L_x L_y - L_y L_x = i L_z \Rightarrow S_x S_y - S_y S_x = i S_z$$

$$[L^2, L_\alpha] = 0 \Rightarrow [S^2, S_\alpha] = 0$$

Если ввести повышающий и понижающий операторы: $S_\pm = S_x \pm i S_y$

$$\Rightarrow [S_+, S_-] = 2 S_z; \quad [S_z, S_\pm] = \pm S_\pm$$

$$S_+ |S, \vec{r}\rangle \sim |S, \vec{r}+1\rangle$$

$$S_- |S, \vec{r}\rangle \sim |S, \vec{r}-1\rangle$$

Для матричных элементов можно показать:

$$\langle S, \vec{r}-1 | S_- | S, \vec{r} \rangle = \langle S, \vec{r} | S_+ | S, \vec{r}-1 \rangle = \sqrt{(S+\vec{r})(S-\vec{r}+1)}$$

Для $S = \frac{1}{2}$: $S_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ $S_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \rightarrow$ крест или S_x, S_y, S_z

$$\hat{S}_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{S}_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Собственные числа матрицы для S_z и S^2 :

$$S_z |S, \vec{r}\rangle = \vec{r} |S, \vec{r}\rangle$$

$$S^2 |S, \vec{r}\rangle = S(S+1) |S, \vec{r}\rangle$$

Т-оформления $\rightarrow S^2 - S_z^2 = S_x^2 + S_y^2 \rightarrow$ Если S_z увеличивать, то правая часть может стать отриц. $\rightarrow$ т.е. есть макс. значение

$$S = \vec{r}_{\max} \rightarrow 2S = \vec{r} \Rightarrow S \text{ и } \vec{r} \text{ получены.}$$

$\vec{r}$ -соед. число - проекция спина на ось.
 S - спин.

$$S=0 \rightarrow \vec{r}=0$$

$$S=\frac{1}{2} \rightarrow \vec{r}=\pm \frac{1}{2}$$

$$S=1 \rightarrow \vec{r}=-1, 0, 1$$

То с соед. числами и соед. ф-циями для $S=\frac{1}{2}$:

$$1) \hat{S}_x \psi = \lambda \psi \Rightarrow \begin{vmatrix} -\lambda & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - \frac{1}{4} = 0 \Rightarrow \lambda_{1,2} = \pm \frac{1}{2}$$

$$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \psi_1 = \psi_2 \Rightarrow \psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix} \leftarrow \psi_1^2 + \psi_2^2 = 1$$

$$\psi_{+} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$2) \hat{S}_y \psi = \lambda \psi \Rightarrow \begin{vmatrix} -\lambda & -\frac{i}{2} \\ \frac{i}{2} & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - \frac{1}{4} = 0$$

$$\begin{pmatrix} -\frac{i}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{i}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix}$$

$$\psi_{+} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$$

$$3) \hat{S}_z \psi = \lambda \psi \Rightarrow \begin{vmatrix} \frac{1}{2}-\lambda & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}-\lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda = \pm \frac{1}{2} \Rightarrow \psi_{\pm} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \psi_{\mp} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Для елем $\frac{1}{2}$ оператор кохечного вращення:

$$R_{\vec{q}} = e^{i\frac{\varphi}{2}(\vec{n}, \vec{\sigma})} \sim \text{в хвості вектора}$$

$$F(\alpha + \vec{\sigma} \cdot \vec{r}) = e, i + e_2(\alpha + \vec{\sigma} \cdot \vec{r})$$

$$e^{i\alpha \vec{\sigma}} = C_1 + C_2 \vec{\sigma} \cdot \vec{r}$$

$$\begin{cases} e^{i\alpha} = C_1 + C_2 \alpha \rightarrow 2C_2 \alpha = 2i \sin \alpha \rightarrow C_2 = \frac{i \sin \alpha}{\alpha} \\ e^{-i\alpha} = C_1 - C_2 \alpha \rightarrow 2C_1 = 2 \cos \alpha \rightarrow C_1 = \cos \alpha \end{cases}$$

$$R_{\vec{q}} = \cos \frac{\varphi}{2} + i(\vec{n}, \vec{\sigma}) \sin \frac{\varphi}{2}$$

В3. (4.29) В одній сфері рішення виходиться крізь поверхню Паулі.

$$\psi_{0,0}(r) = A e^{-\frac{r}{a}} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \alpha = \frac{A^2}{4\pi} \sim \text{радіус Бора}$$

$$\int_0^\infty A^2 e^{-\frac{2r}{a}} r^2 dr = 1$$

$$\int_0^\infty e^{-\frac{2r}{a}} r^2 dr = \begin{cases} u = r^2 \rightarrow du = 2r dr \\ dv = e^{-\frac{2r}{a}} dr \rightarrow v = -\frac{a}{2} e^{-\frac{2r}{a}} \end{cases} = -\frac{a}{2} e^{-\frac{2r}{a}} r^2 \Big|_0^\infty + \int_0^\infty \frac{a}{2} \cdot 2r e^{-\frac{2r}{a}} dr =$$

$$= a \int_0^\infty e^{-\frac{2r}{a}} r dr = \begin{cases} u = r \rightarrow du = dr \\ dv = e^{-\frac{2r}{a}} dr \rightarrow v = -\frac{a}{2} e^{-\frac{2r}{a}} \end{cases} = a \left[-\frac{a}{2} e^{-\frac{2r}{a}} r \Big|_0^\infty + \frac{a}{2} \int_0^\infty e^{-\frac{2r}{a}} dr \right] =$$

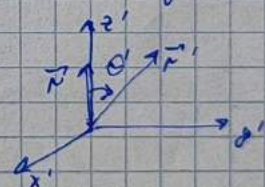
$$= \frac{a^2}{2} \cdot \left(-\frac{a}{2} \right) e^{-\frac{2r}{a}} \Big|_0^\infty = \frac{a^3}{4} \Rightarrow A^2 = \frac{4}{a^3}$$

В3 24: $\Delta \varphi = -4\pi \rho(\vec{r})$, где $\rho(\vec{r}) = \tilde{e} \delta(\vec{r}) - \tilde{e} |\psi_0(r)|^2 \sim \text{как вероятность нахождения в точке}$

$$\varphi(\vec{r}) = \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 \vec{r}'$$

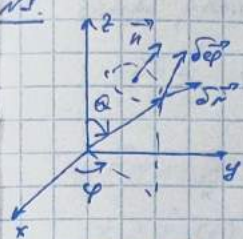
$$\varphi(\vec{r}) = \frac{\tilde{e}}{r} - \tilde{e} \int \frac{|\psi_0(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 \vec{r}'$$

$$I = -\tilde{e} \int \frac{A^2 e^{-\frac{2r}{a}}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 \vec{r}' \quad \text{⊖}$$



$$|\vec{r} - \vec{r}'| = \sqrt{(\vec{r} - \vec{r}', \vec{r} - \vec{r}')} = \sqrt{r^2 - 2r r' \cos \theta + r'^2} = \sqrt{r^2 - 2r r' \cos \theta + r'^2}$$

$$I = -\tilde{e} \cdot 2\pi A^2 \int_0^\infty \frac{e^{-\frac{2r}{a}} r^2 dr}{\sqrt{r^2 + r'^2 - 2r r' \cos \theta}} r' d\theta = -\tilde{e} \cdot 2\pi A^2 \int_0^\infty \frac{e^{-\frac{2r}{a}} r^2 d(-\cos \theta)}{\sqrt{r^2 + r'^2 - 2r r' \cos \theta}}$$



Выбор был сделан. малый поворот отн. оси $\vec{n}$, нулем введем $\delta \vec{r}$ так, чтобы не изменилась длина вектора:

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

$$\psi(\vec{r} + \delta \vec{r}) = \psi(\vec{r}) + \delta \vec{r} \cdot \nabla \psi(\vec{r}) = (1 + \delta \vec{r} \cdot \nabla) \psi(\vec{r}) = \{1 + ([\delta \vec{\varphi} \times \vec{r}] \cdot \nabla)\} \psi$$

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

$$\Rightarrow \hat{R}_{\delta \vec{\varphi}} = \frac{i}{\hbar} \delta \vec{\varphi} \hat{L} \sim \text{оператор малой поворота.}$$

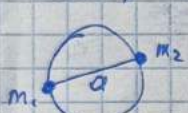
$\hat{L} = \hbar \vec{e} \sim$ орбитальный момент (как безразмерная величина)

Для малого поворота вокруг Oz:

$$f(\varphi, \varphi + \delta \varphi) \approx f(\varphi) + \delta \varphi \frac{\partial f}{\partial \varphi} = (1 + \delta \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi}) f(\varphi) = (1 + \delta \varphi \frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \varphi}) f$$

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

Ротатор - можно рассматривать как вращение отн. оси z:



$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \sim$ приведенная масса.

$$\hat{H} \psi(\varphi) = E \psi(\varphi) \quad \text{где } \hat{H} = \frac{\hat{L}_z^2}{2I}$$

Собств. ф-ии L_z :

$$\frac{\partial f}{\partial \varphi} = \frac{i\lambda}{\hbar} f(\varphi) \Rightarrow f(\varphi) = C_1 e^{i\lambda \varphi}, \quad \lambda \in \mathbb{Z}, \quad \text{т.е. } f(\varphi) = f(\varphi + 2\pi)$$

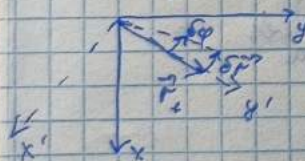
$$\text{Нормировка: } C_1 \int_0^{2\pi} e^{i\lambda \varphi} e^{-i\lambda \varphi} d\varphi = 1 \Rightarrow C_1 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \Rightarrow f(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\lambda \varphi}$$

Подставим в ур-е Шредингера:

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} - 2IE f = 0 \Rightarrow \hbar^2 \frac{\lambda^2}{2\pi^2} e^{i\lambda \varphi} - 2IE \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\lambda \varphi} = 0 \Rightarrow E = \frac{\hbar^2 \lambda^2}{2I}$$

Как вычисляются другие операторы? Визуально геометрически, поворот отн.

Если представить поворот отн. оси x' , то будет меняться только угол φ : у нас же есть угол $\varphi + \alpha$ т.е. угол падает по новому вектору.



$$\hat{L}_{x'} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Если пролить относительно y' , то из рисунка:

$$\begin{aligned} \sin \delta \varphi \approx \delta \varphi &= \frac{\delta r}{r_+} \Rightarrow \delta r = r_+ \sin \delta \varphi \\ \sin \delta \varphi' \approx \delta \varphi' &= \frac{\delta r'}{r_{++}} \Rightarrow \delta r = r_{++} \sin \delta \varphi' \end{aligned} \Rightarrow \delta \varphi' = \frac{r_+}{r_{++}} \delta \varphi$$

$$\Rightarrow \hat{L}_{y'} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi'} = i\hbar \frac{r_+}{r_{++}} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Далее аналогично преобр. в декарт. с.с.

$$\begin{cases} x = x' \sin \varphi + y' \cos \varphi \\ y = -x' \cos \varphi + y' \sin \varphi \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \hat{L}_x = \hat{L}_{x'} \sin \varphi + \hat{L}_{y'} \cos \varphi \\ \hat{L}_y = -\hat{L}_{x'} \cos \varphi + \hat{L}_{y'} \sin \varphi \end{cases}$$

$$\Rightarrow \hat{L}_x = i\hbar \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} + i\hbar \cos \varphi \frac{r_+}{r_{++}} \frac{\partial}{\partial \varphi}; \quad \hat{L}_y = -i\hbar \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} + i\hbar \sin \varphi \frac{r_+}{r_{++}} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

№3. Пробная ф-я: $\psi(r) = A e^{-\frac{\alpha r^2}{2}}$

$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{\gamma}{r}$, т.к. $n=1 \Rightarrow l=0$

$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) + \dots$

Нормировка: $\int_0^\infty |R|^2 r^2 dr = 1$.

$\Rightarrow A^2 \int_0^\infty e^{-\alpha r^2} \cdot r^2 dr = 1$ — по таблице.

$I = \int_0^\infty e^{-\alpha r^2} dr = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha r^2} dr = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$

$I' = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \cdot \frac{1}{2} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = - \int_0^\infty e^{-\alpha r^2} dr \leftarrow \text{гласно, но можно}$

$A^2 \cdot \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}} = 1 \Rightarrow A^2 = \frac{4 \sqrt{\alpha^3}}{\sqrt{\pi}} \rightarrow A = 2 \frac{\alpha^{3/4}}{\sqrt{\pi}}$

$\langle \hat{T}_x \rangle = \int_0^\infty A^2 e^{-\frac{\alpha r^2}{2}} \cdot \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right) \cdot \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r} e^{-\frac{\alpha r^2}{2}}) r^2 dr$

$\frac{\partial}{\partial r} (r^2 \cdot e^{-\frac{\alpha r^2}{2}} \cdot (-\alpha r)) = \frac{\partial}{\partial r} (-\alpha r^3 e^{-\frac{\alpha r^2}{2}}) = -3\alpha r^2 e^{-\frac{\alpha r^2}{2}} + \alpha^2 r^4 e^{-\frac{\alpha r^2}{2}}$

③ $-\frac{\hbar^2}{2m} A^2 \int_0^\infty e^{-\frac{\alpha r^2}{2}} \cdot \left(\alpha^2 r^4 e^{-\frac{\alpha r^2}{2}} - 3\alpha r^2 e^{-\frac{\alpha r^2}{2}}\right) dr =$

$= -\frac{\hbar^2}{2m} A^2 \cdot \alpha^2 \int_0^\infty e^{-\alpha r^2} r^4 dr + \frac{\hbar^2}{2m} A^2 3\alpha \int_0^\infty e^{-\alpha r^2} r^2 dr =$

$= -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{4 \alpha^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{3 \alpha^{3/2}}{8 \alpha^{3/2}} + \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{4 \alpha^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \cdot 3\alpha \cdot \frac{1}{4 \alpha^{3/2}} =$

$= -\frac{3}{4} \frac{\hbar^2}{m \alpha} + \frac{3}{2} \frac{\hbar^2}{m \alpha} = -\frac{3}{4} \frac{\hbar^2}{m \alpha} + \frac{6}{4} \frac{\hbar^2}{m \alpha} = \frac{3}{4} \frac{\hbar^2}{m \alpha}$

$\langle \hat{U}_x \rangle = \int_0^\infty A^2 e^{-\frac{\alpha r^2}{2}} \cdot \left(-\frac{\gamma}{r}\right) \cdot e^{-\frac{\alpha r^2}{2}} \cdot r^2 dr = -\frac{\gamma A^2}{2} \int_0^\infty e^{-\alpha r^2} r dr = \begin{cases} u = -\alpha r^2 \\ du = -2\alpha r dr \\ dr = -\frac{du}{2\alpha r} \end{cases}$

$= -\frac{\gamma A^2}{2} \int_0^\infty \left(-\frac{du}{2\alpha r} \cdot r e^u\right) du = \frac{\gamma A^2}{2\alpha} \int_0^\infty e^u du =$

$= \frac{\gamma A^2}{2\alpha} \cdot \frac{1}{\alpha} e^u \Big|_0^\infty = \frac{\gamma A^2}{2\alpha} = \frac{\gamma}{2} \cdot \frac{1}{\alpha} \cdot \frac{4 \alpha^{3/2}}{\sqrt{\pi}} = \frac{2\gamma}{\sqrt{\pi}} \alpha^{1/2}$

$\Rightarrow \langle H_x \rangle = \frac{3}{4} \frac{\hbar^2}{m \alpha} - \frac{2\gamma}{\sqrt{\pi}} \alpha^{1/2}$

$\Rightarrow \left(\langle H_x \rangle\right)'_\alpha = \frac{3}{4} \frac{\hbar^2}{m} - \frac{\gamma}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\alpha}} = 0 \Rightarrow \frac{3\hbar^2 \sqrt{\pi} \sqrt{\alpha} - 4m\gamma}{4m\sqrt{\pi} \sqrt{\alpha}} = 0$

$\Rightarrow 3\hbar^2 \sqrt{\pi} \sqrt{\alpha} = 4m\gamma \Rightarrow \sqrt{\alpha} = \frac{4m\gamma}{3\hbar^2 \sqrt{\pi}} \rightarrow \alpha_{\min} = \frac{16 m^2 \gamma^2}{9 \hbar^4 \pi}$

$\Rightarrow E_1 = \min \langle H_x \rangle = \frac{3}{4} \frac{\hbar^2}{m} \cdot \frac{16 m^2 \gamma^2}{9 \hbar^4 \pi} - \frac{2\gamma}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{4m\gamma}{3\hbar^2 \sqrt{\pi}} = \frac{4}{3} \frac{m\gamma^2}{\hbar^2} - \frac{8m\gamma^2}{3\hbar^2} = -\frac{4m\gamma^2}{3\hbar^2}$

№2. Телеработы классическое ур-е Шредингера:

$$i\hbar \dot{\psi} = (\hat{H}^{(0)} + V(\vec{r}, t)) \psi$$

Если мы знаем ф-лу нулевого порядка то полное решение можно разложить

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_n C_n(t) \psi_n^{(0)}(\vec{r}) \Rightarrow \hat{H}^{(0)} \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}$$

$$i\hbar \sum_n \dot{C}_n(t) \psi_n^{(0)}(\vec{r}) = \hat{H}^{(0)} \sum_n C_n(t) \psi_n^{(0)}(\vec{r}) + V \sum_n C_n(t) \psi_n^{(0)}(\vec{r}) \quad / \cdot \langle \psi_m^{(0)} | + \int$$

$$\Rightarrow i\hbar \dot{C}_m = E_m^{(0)} C_m(t) + \sum_n V_{mn}(t) C_n(t)$$

В нулевой приближении $V_{mn}(t) \approx 0$

$$\Rightarrow i\hbar \dot{C}_m = E_m^{(0)} C_m(t) \Rightarrow C_m(t) = C_m(0) e^{-\frac{iE_m^{(0)}t}{\hbar}}$$

Уточняем поправки (вариационный): $C_n(t) = d_n(t) e^{-\frac{iE_n^{(0)}t}{\hbar}}$

$$\Rightarrow \dot{C}_m = \dot{d}_m e^{-\frac{iE_m^{(0)}t}{\hbar}} - \frac{iE_m^{(0)}}{\hbar} d_m e^{-\frac{iE_m^{(0)}t}{\hbar}} \rightarrow \text{подставим}$$

$$i\hbar \dot{d}_m e^{-\frac{iE_m^{(0)}t}{\hbar}} + E_m^{(0)} d_m e^{-\frac{iE_m^{(0)}t}{\hbar}} - E_m^{(0)} d_m e^{-\frac{iE_m^{(0)}t}{\hbar}} + \sum_n V_{mn} d_n e^{-\frac{iE_n^{(0)}t}{\hbar}}$$

$$\Rightarrow \tilde{V}_{mn}(t) = V_{mn} e^{i\left(\frac{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}{\hbar} t\right)} \quad ; \quad \Omega_{mn} = \frac{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}{\hbar}$$

$$\Rightarrow i\hbar \dot{d}_m = \sum_n \tilde{V}_{mn}(t) d_n(t) \rightarrow \text{подставим в ур-е Шредингера в представлении возмущений.}$$

Если есть гармоническое возмущение:

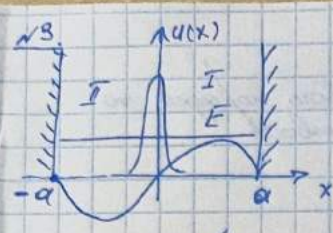
$$V_{mn} = (F_{mn} e^{-i\omega t} + F_{nm}^* e^{+i\omega t})$$

$$\Rightarrow \tilde{V}_{mn} = F_{mn} e^{i(\Omega_{mn} - \omega)t} + F_{nm}^* e^{i(\Omega_{mn} + \omega)t}$$

Если в начальный момент система была в k-ой состоянии: $d_k(t=0) = \delta_{nk}$

$$\Rightarrow i\hbar \dot{d}_m = \tilde{V}_{mk} = F_{mk} e^{i(\Omega_{mk} - \omega)t} + F_{km}^* e^{i(\Omega_{mk} + \omega)t}$$

$$\Rightarrow d_{mk}(t) = \frac{1}{i\hbar} \left[\frac{F_{mk} e^{i(\Omega_{mk} - \omega)t}}{i(\Omega_{mk} - \omega)} + \frac{F_{km}^* e^{i(\Omega_{mk} + \omega)t}}{i(\Omega_{mk} + \omega)} \right]$$



$$\hat{H}\psi = E\psi; \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)$$

в I и II:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = E\psi \Rightarrow \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \kappa^2 \psi = 0; \quad \kappa^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Можно сразу сказать в буре:

$$\text{ГД: } \begin{cases} \psi_I(x=a) = 0 \\ \psi_{II}(x=-a) = 0 \end{cases}$$

$$\psi_I = A \sin[\kappa(x-a)] \quad x > 0$$

$$\psi_{II} = \tilde{B} \sin[\kappa(x+a)] \quad x < 0$$

→ Чётные функции, функции симметричны.

ГД на границе ф-ии: $\left. \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_{0+0} - \left. \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_{0-0} = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(0)$

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$$

$$A \sin(-\kappa a) = \tilde{B} \sin(\kappa a) \Rightarrow \tilde{B} = -A \text{ или } \tilde{A} = -\tilde{B}$$

$$\Rightarrow \psi_I = -\tilde{B} \sin[\kappa(x-a)]$$

$$\psi_{II} = \tilde{B} \sin[\kappa(x+a)]$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \psi_I}{\partial x} = -\tilde{B} \kappa \cos[\kappa(x-a)]; \quad \frac{\partial \psi_{II}}{\partial x} = \kappa \tilde{B} \cos[\kappa(x+a)]$$

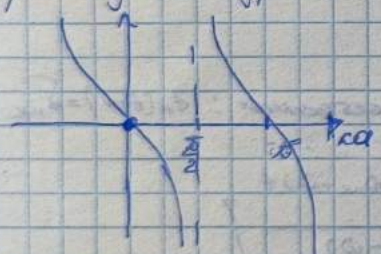
$$-\tilde{B} \kappa \cos(\kappa a) - \kappa \tilde{B} \cos \kappa a = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \tilde{B} \sin(\kappa a) \quad / \cdot \frac{a}{\sin \kappa a}$$

$$+ \kappa \cot(\kappa a) = \frac{m\alpha a}{\hbar^2}$$

транцендентное ф-е

$$E = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}, \quad -\tan \kappa a = \frac{m\alpha a}{\hbar^2} \cdot \kappa a \equiv \frac{\kappa a}{\xi}$$

$$\text{по условию } \xi \gg 1 \Rightarrow \kappa a \ll \xi$$



Если бы ф-я была линейной, в $x=0 \rightarrow 0$, то она бы не удовлетворяла бы ф-но совеси:

$$\psi = A \cos \kappa x + B \sin \kappa x \equiv C \sin \kappa x \Rightarrow \text{на границе } \sin \kappa a = 0$$

$$\kappa a = \pi n \Rightarrow \frac{2mE}{\hbar^2} a^2 = \pi^2 n^2 \Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}$$

№2. Составим стационарное ур-е Шредингера:

$$i\hbar \dot{\psi} = (\hat{H}^{(0)} + V(\vec{r}, t)) \psi \quad \text{Если нам известна ф-ия нулевого порядка то такое решение можно разложить.}$$

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_n C_n(t) \psi_n^{(0)}(\vec{r}) \Rightarrow \hat{H}^{(0)} \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}$$

$$i\hbar \sum_n \dot{C}_n(t) \psi_n^{(0)}(\vec{r}) = \hat{H}^{(0)} \sum_n C_n(t) \psi_n^{(0)}(\vec{r}) + V \sum_n C_n(t) \psi_n^{(0)}(\vec{r}) \quad | \cdot \langle \psi_m^{(0)} | + \int$$

$$\Rightarrow i\hbar \dot{C}_m = E_m^{(0)} C_m(t) + \sum_n V_{mn}(t) C_n(t)$$

В нулевом приближении $V_{mn}(t) \approx 0$

$$\Rightarrow i\hbar \dot{C}_m = E_m^{(0)} C_m(t) \Rightarrow C_m(t) = C_m(0) e^{-\frac{iE_m^{(0)}t}{\hbar}}$$

Варьируем константы: $C_m(t) = f_m(t) e^{-\frac{iE_m^{(0)}t}{\hbar}}$

$$\Rightarrow \dot{C}_m = \dot{f}_m e^{-\frac{iE_m^{(0)}t}{\hbar}} - \frac{iE_m^{(0)}}{\hbar} f_m e^{-\frac{iE_m^{(0)}t}{\hbar}}$$

$$i\hbar \dot{f}_m e^{-\frac{iE_m^{(0)}t}{\hbar}} + E_m^{(0)} f_m e^{-\frac{iE_m^{(0)}t}{\hbar}} = E_m^{(0)} f_m e^{-\frac{iE_m^{(0)}t}{\hbar}} + \sum_n V_{mn} f_n e^{-\frac{iE_n^{(0)}t}{\hbar}}$$

$$\Rightarrow \tilde{V}_{mn}(t) = V_{mn} e^{i(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})t} = V_{mn} e^{i\omega_{mn}t}$$

$$\Rightarrow i\hbar \dot{f}_m = \sum_n \tilde{V}_{mn}(t) f_n(t) \rightarrow \text{правая часть}$$

Если есть гармоническое возмущение:

$$V_{mn} = (F_{mn} e^{-i\omega t} + F_{nm}^* e^{i\omega t})$$

$$\Rightarrow \tilde{V}_{mn} = F_{mn} e^{i(\omega_{mn} - \omega)t} + F_{nm}^* e^{i(\omega_{mn} + \omega)t}$$

Если в нач. момент времени была в k-ом состоянии: $f_k(t=0) = \delta_{mk}$

$$\Rightarrow i\hbar \dot{f}_m = \tilde{V}_{mk} = F_{mk} e^{i(\omega_{mk} - \omega)t} + F_{km}^* e^{i(\omega_{mk} + \omega)t}$$

$$\Rightarrow f_{mk} = \frac{1}{i\hbar} \left[\frac{F_{mk} e^{i(\omega_{mk} - \omega)t}}{i(\omega_{mk} - \omega)} + \frac{F_{km}^* e^{i(\omega_{mk} + \omega)t}}{i(\omega_{mk} + \omega)} \right]$$

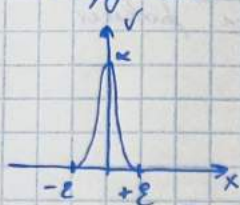


Если энергия фотона достаточно, чтобы преодолеть из дисперсного спектра в сплошной, то справедливо правило Ферми

$$\{ \omega_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |F_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \} \rightarrow \text{вероятность перехода в единицу времени } i \rightarrow f.$$

н.1. $i\hbar \dot{\psi}(x) = \hat{H}\psi$, где $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$

δ -функция в потенциальной энергии, ЭШ в области с потенциалом:



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

$$\int_{-\epsilon}^{\epsilon} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} dx + \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \alpha \delta(x) \psi(x) dx = \int_{-\epsilon}^{\epsilon} E \psi(x) dx$$

$\sim E \cdot \Delta x \rightarrow 0$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d\psi}{dx} \Big|_{\epsilon} - \frac{d\psi}{dx} \Big|_{-\epsilon} \right) + \alpha \psi(0) = 0$$

$$\Rightarrow \left\{ \frac{d\psi}{dx} \Big|_{+0} - \frac{d\psi}{dx} \Big|_{-0} = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(0) \right\}$$

Второе условие — интегрируем 2 раза:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \int_{-\epsilon}^x \frac{d^2\psi}{dy^2} dy + \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \int_{-\epsilon}^x \alpha \delta(y) \psi(y) dy = E \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \int_{-\epsilon}^x \psi(y) dy$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \left[\frac{d\psi}{dx} - \frac{d\psi}{dx} \Big|_{-\epsilon} \right] + \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \alpha \psi(0) \Theta(x) = E \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \psi(x_0) (x+\epsilon)$$

$$\int_{-\epsilon}^x dy \alpha \delta(y) \psi(y) = \alpha \psi(0) \Theta(x) \sim \text{ф-я Хевисайда}$$

$$\Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) \cdot [\psi(+\epsilon) - \psi(-\epsilon)] + \alpha \psi(0) \cdot \epsilon = E \psi(x) \left(\frac{x^2}{2} + \epsilon x \right) \Big|_{-\epsilon}^{\epsilon}$$

$$\Rightarrow \left\{ \psi(+0) = \psi(-0) \right\}$$

н.2. Если стационарное ур-е Шредингера:

$$\hat{H}\psi = E\psi, \text{ где } \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \text{ — малое возмущение}$$

“нулевое приближение” — невозмущенная задача.

$$\hat{H}_0 \psi^{(0)} = E^{(0)} \psi^{(0)}; \quad \psi = \sum_m C_m \psi_m^{(0)}$$

$$\Rightarrow \sum_m C_m (E_m^{(0)} + \hat{V}) \psi_m^{(0)} = \sum_m C_m E \psi_m^{(0)} \quad \Big| \cdot \langle \psi_k^{(0)} | + \int$$

$$\int \psi_k^* \psi_m dx = \delta_{km}$$

$$(E_k^{(0)} - E) C_k + \sum_m V_{km} C_m = 0$$

$$(E - E_k^{(0)}) C_k = \sum_m V_{km} C_m \quad (*)$$

Ищем коэф-ты и энергию в виде:

$$E = E^{(0)} + E^{(1)} + E^{(2)} + \dots; \quad C_k = C_k^{(0)} + C_k^{(1)} + C_k^{(2)} + \dots$$

Первое приближение для k -й энергии:

$$E = E_n^{(0)} + E_n^{(1)}; \quad C_k = C_k^{(0)} + C_k^{(1)} \text{ где } k=n$$

$$\Rightarrow (E_n^{(0)} + E_n^{(1)} - E_k^{(0)}) (C_k^{(0)} + C_k^{(1)}) = \sum_m V_{km} C_m^{(0)} \quad C_m^{(0)} = 0, \quad m \neq n \text{ в 0-прибл.}$$

$$k=n;$$

$$\Rightarrow C_n^{(0)} E_n^{(1)} + C_n^{(1)} E_n^{(0)} = V_{nn} \equiv V_{nn}$$

$C_n^{(0)} = 1$ $\sim 2 \text{ н.м.с.}$

$$\Rightarrow E_n^{(1)} \approx V_{nn}$$

Поправка первого приближения к собств. значению $E_n^{(0)}$ равна средней значению возмущения в соб. ф-н $\varphi_n^{(0)}$.

Если $k \neq n$ соотношения (*):

$$(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}) C_k^{(1)} = V_{kn} \rightarrow C_k^{(1)} = \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}, \quad k \neq n$$

т.к. $C_n^{(0)} = 0, k \neq n$

2-го порядка:

$$E = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)}; \quad C_k = C_k^{(0)} + C_k^{(1)} + C_k^{(2)}, \quad k \neq n$$

$$(E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} - E_n^{(0)}) (C_n^{(0)} + C_n^{(1)} + C_n^{(2)}) = \sum_m V_{nm} (C_m^{(0)} + C_m^{(1)})$$

$\downarrow$ $\downarrow$ $\rightarrow$ можно так сделать из нормировки

$$C_n^{(0)} E_n^{(1)} + E_n^{(0)} C_n^{(1)} = V_{nn} + \sum_m V_{nm} C_m^{(1)}$$

$$\Rightarrow E_n^{(2)} = \sum_m \frac{V_{nm} V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

$$\Rightarrow E_n \approx E_n^{(0)} + V_{nn} + \sum_m \frac{|V_{nm}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

1.3. Собств. значения $\hat{f} = \alpha \hat{I} + \vec{b} \cdot \vec{\sigma}$

$$f \psi = \lambda \psi$$

$$\vec{b} \cdot \vec{\sigma} = b_x \hat{\sigma}_x + b_y \hat{\sigma}_y + b_z \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 0 & b_x \\ b_x & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -ib_y \\ ib_y & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_z & 0 \\ 0 & -b_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_z & b_x - ib_y \\ b_x + ib_y & -b_z \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \alpha \hat{I} + \vec{b} \cdot \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \alpha + b_z & b_x - ib_y \\ b_x + ib_y & \alpha - b_z \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{vmatrix} \alpha + b_z - \lambda & b_x - ib_y \\ b_x + ib_y & \alpha - b_z - \lambda \end{vmatrix} = \alpha^2 - \alpha b_z - \alpha \lambda + b_z \alpha - b_z^2 - b_z \lambda - \lambda \alpha + \lambda b_z + \lambda^2 - (b_x + ib_y)(b_x - ib_y) = 0$$

$$\lambda^2 + \alpha^2 - 2\lambda\alpha - b_z^2 - b_x^2 - b_y^2 = 0$$

$$\lambda^2 - 2\lambda\alpha - b^2 + \alpha^2 = 0$$

$$\lambda_{1,2} = \alpha \pm \frac{1}{2} \sqrt{4\alpha^2 + 4b^2 - 4\alpha^2} = \alpha \pm |\vec{b}| \Rightarrow \lambda_{1,2} = \alpha \pm |\vec{b}|$$

В центральном поле потенциал не зависит от углов $\rightarrow U \equiv U(|\vec{r}|)$
 Стационарные решения:

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \text{ где } \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + U(|\vec{r}|)$$

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

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_{\ell, m}(\theta, \varphi) \sim \text{сферические гармоники}$$

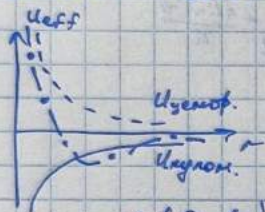
$$\hat{L}^2 Y_{\ell, m}(\theta, \varphi) = \ell(\ell+1) Y_{\ell, m}(\theta, \varphi) \rightarrow \text{в ф-е не входит к.в. число } m \rightarrow \text{по правилу вырождения } (2\ell+1) \text{ раз.}$$

- ось z можно выбрать как угодно

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial R}{\partial r} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} R + U(r) R = ER$$

Можно ввести:

$$U_{\text{eff}} = U(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} \sim \text{эффективная энергия}$$



$$N3. \hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \leftarrow \text{где } s = 1/2$$

$$1) \hat{S}_x \psi = \lambda \psi \Rightarrow \begin{vmatrix} -\lambda & \hbar/2 \\ \hbar/2 & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - \frac{\hbar^2}{4} = 0 \Rightarrow \lambda_{1,2} = \pm \frac{\hbar}{2}$$

$$\begin{pmatrix} -\hbar/2 & \hbar/2 \\ \hbar/2 & -\hbar/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \psi_1 = \psi_2 \Rightarrow \psi_{x+} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\psi_{x-} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$\text{Нормировка: } \psi_1^* \psi_1 + \psi_2^* \psi_2 = 1$$

$$2) \hat{S}_y \psi = \lambda \psi$$

$$\begin{vmatrix} -\lambda & -\hbar/2 i \\ \hbar/2 i & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - \frac{\hbar^2}{4} = 0 \Rightarrow \lambda_{1,2} = \pm \frac{\hbar}{2}$$

$$\begin{pmatrix} -\hbar/2 & \hbar/2 i \\ \hbar/2 i & -\hbar/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \psi_{y+} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \hbar/2 & \hbar/2 i \\ \hbar/2 i & \hbar/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \psi_{y-} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

$$3) \hat{S}_z \psi = \lambda \psi \Rightarrow \begin{vmatrix} \hbar/2 - \lambda & 0 \\ 0 & -\hbar/2 - \lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow -(\hbar/2 + \lambda)(\hbar/2 - \lambda) = 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \lambda_{1,2} = \pm \frac{\hbar}{2}$$

$$\begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \psi_{z+} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \psi_{z-} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

2. Составим нестационарное ур-е Шредингера:

$i\hbar \dot{\psi} = (\hat{H}_0 + V(\vec{r}, t)) \psi$ Если нам известны ф-ии нулевого уровня, то полное решение можно разложить.

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_n C_n(t) \psi_n^{(0)}(\vec{r}) \Rightarrow \hat{H}_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}$$

$$i\hbar \sum_n \dot{C}_n(t) \psi_n^{(0)}(\vec{r}) = H_0 \sum_n C_n(t) \psi_n^{(0)}(\vec{r}) + V \sum_n C_n(t) \psi_n^{(0)}(\vec{r}) \quad | \cdot \langle \psi_m^{(0)} | + \int$$

$$\Rightarrow i\hbar \dot{C}_m = E_m^{(0)} C_m(t) + \sum_n V_{mn}(t) C_n(t)$$

В нулевой приближении $V_{mn}(t) \approx 0$

$$\Rightarrow i\hbar \dot{C}_m = E_m^{(0)} C_m(t) \Rightarrow C_m(t) = C_m(0) e^{-\frac{iE_m^{(0)} t}{\hbar}}$$

И угадаем константу (варьируем): $C_m(t) = d_m(t) e^{-\frac{iE_m^{(0)} t}{\hbar}}$

$$C_m = d_m e^{-\frac{iE_m^{(0)} t}{\hbar}} = \frac{iE_m^{(0)}}{\hbar} d_m e^{-\frac{iE_m^{(0)} t}{\hbar}} \quad \text{представим}$$

$$i\hbar \dot{d}_m e^{-\frac{iE_m^{(0)} t}{\hbar}} + E_m^{(0)} d_m e^{-\frac{iE_m^{(0)} t}{\hbar}} = E_m^{(0)} d_m e^{-\frac{iE_m^{(0)} t}{\hbar}} + \sum_n V_{mn} d_n e^{-\frac{iE_n^{(0)} t}{\hbar}}$$

$$\Rightarrow \tilde{V}_{mn}(t) = V_{mn} e^{i \frac{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}{\hbar} t} \equiv V_{mn} e^{i\omega_{mn} t}$$

$$\Rightarrow i\hbar \dot{d}_m = \sum_n \tilde{V}_{mn}(t) d_n(t) \rightarrow \text{находим поправку.}$$

Если есть гармоническое возмущение:

$$V_{mn} = (F_{mn} e^{-i\omega t} + F_{nm}^* e^{i\omega t})$$

$$\Rightarrow \tilde{V}_{mn} = F_{mn} e^{i(\omega_{mn} - \omega)t} + F_{nm}^* e^{i(\omega_{mn} + \omega)t}$$

Если в нач. момент времени была в k -ой состоянии: $d_k(t=0) = \delta_{kk}$

$$\Rightarrow i\hbar \dot{d}_m = \tilde{V}_{mk} = F_{mk} e^{i(\omega_{mk} - \omega)t} + F_{km}^* e^{i(\omega_{mk} + \omega)t}$$

$$\Rightarrow d_{mk}^{(1)} = \frac{1}{i\hbar} \left[\frac{F_{mk} e^{i(\omega_{mk} - \omega)t}}{i(\omega_{mk} - \omega)} + \frac{F_{km}^* e^{i(\omega_{mk} + \omega)t}}{i(\omega_{mk} + \omega)} \right]$$

н.с.

 $f(z) = f(a + \vec{b}\vec{\sigma}) \rightarrow$ по опр-но берем ф-ии от операторов

$$f(\hat{z}) = \sum \frac{z^n}{n!} \frac{\partial^n f}{\partial z^n} \Big|_{z=\hat{z}}$$

Мен сформировали матрицы Паули, показывали:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix};$$

$$\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = \hat{I}$$

матрицы Паули можно умножать и комбинировать $\rightarrow$ получим тоже матрицы Паули.

$\hat{z} = a + (\vec{b}\vec{\sigma})$ - их можно рассматривать как операторные значения.

$\Rightarrow$ Все степени можно выразить через линейные комбинации $\rightarrow$ будет тоже матрицы Паули, но с коэф-тами:

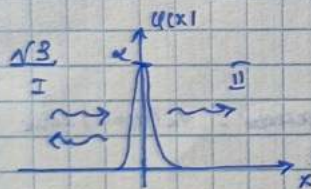
$$\Rightarrow f(a\hat{I} + \vec{b}\vec{\sigma}) = A + B\vec{\sigma}$$

Проверим е.к. возьмем $\vec{b} = \vec{e}_z$:

$$\vec{z} = \vec{e}_z \Rightarrow f(a + b_z \hat{\sigma}_z) = f \begin{pmatrix} a+b_z & 0 \\ 0 & a-b_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A+B_z & 0 \\ 0 & A-B_z \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} f(a+b_z) = A+B_z \\ f(a-b_z) = A-B_z \end{cases} \Rightarrow A = \frac{f(a+b_z) + f(a-b_z)}{2}; \quad B_z = \frac{f(a+b_z) - f(a-b_z)}{2}$$

$$\text{В аналогично е.к.:} \Rightarrow B = \frac{\vec{b}}{b} \cdot \frac{(f(a+b) - f(a-b))}{2}; \quad A = \frac{f(a+b) + f(a-b)}{2}$$



$$\hat{H}\psi = E\psi \Rightarrow \begin{cases} \psi_+(x) = e^{ikx} + r e^{-ikx} \\ \psi_-(x) = t e^{ikx} \end{cases}$$

ГД на δ -функции: $\psi(+0) = \psi(-0)$

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_{+0} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_{-0} = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(0)$$

$$\frac{d\psi_1}{dx} = ik e^{ikx} - ik r e^{-ikx}$$

$$\frac{d\psi_2}{dx} = ik t e^{ikx}$$

$$\Rightarrow \int 1 + r = t \quad \rightarrow r = t - 1$$

$$\frac{2m\alpha}{ik\hbar^2} t = t - 1 + t - 1 \Rightarrow 2t \left(\frac{m\alpha}{ik\hbar^2} - 1 \right) = -2 \Rightarrow t = \frac{-ik\hbar^2}{ik\hbar^2 - m\alpha}$$

$$r = \frac{m\alpha}{ik\hbar^2 - m\alpha}$$

$$\Rightarrow R = |r|^2 = \frac{m^2 \alpha^2}{k^2 \hbar^4 + m^2 \alpha^2}; \quad D = |t|^2 = \frac{k^2 \hbar^4}{k^2 \hbar^4 + m^2 \alpha^2} \Rightarrow \underline{R + D = 1}$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$1) E \rightarrow \infty: k^2 \sim E \Rightarrow R \rightarrow 0 \Rightarrow D \rightarrow 1$$

$$2) E \rightarrow 0: k \rightarrow 0 \Rightarrow R \rightarrow 1 \Rightarrow D \rightarrow 0$$

1.2. Сформулируем неавтономное ур-е Шредингера:

$i\hbar \dot{\psi} = (\hat{H}_0 + V(\vec{r}, t)) \psi$ Если мы знаем ф-ии нулевого порядка, то полное решение можно разложить:

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_n C_n(t) \psi_n^{(0)}(\vec{r}) \Rightarrow \hat{H}_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}$$

$$i\hbar \sum_n \dot{C}_n(t) \psi_n^{(0)}(\vec{r}) = \hat{H}_0 \sum_n C_n(t) \psi_n^{(0)}(\vec{r}) + V \sum_n C_n(t) \psi_n^{(0)}(\vec{r}) \quad | \cdot \langle \psi_m^{(0)} | + \int$$

$$\Rightarrow i\hbar \dot{C}_m = E_m^{(0)} C_m(t) + \sum_n V_{mn}(t) C_n(t)$$

В нулевом приближении $V_{mn}(t) \approx 0$

$$\Rightarrow i\hbar \dot{C}_m = E_m^{(0)} C_m(t) \Rightarrow C_m(t) = C_m(0) e^{-\frac{iE_m^{(0)}t}{\hbar}}$$

Варьируем постоянную: $C_m(t) = d_m(t) e^{-\frac{iE_m^{(0)}t}{\hbar}}$

$$\Rightarrow \dot{C}_m = \dot{d}_m e^{-\frac{iE_m^{(0)}t}{\hbar}} - \frac{iE_m^{(0)}}{\hbar} d_m e^{-\frac{iE_m^{(0)}t}{\hbar}}$$

$$i\hbar \dot{d}_m e^{-\frac{iE_m^{(0)}t}{\hbar}} + E_m^{(0)} d_m e^{-\frac{iE_m^{(0)}t}{\hbar}} = E_m^{(0)} d_m e^{-\frac{iE_m^{(0)}t}{\hbar}} + \sum_n V_{mn}(t) d_n e^{-\frac{iE_n^{(0)}t}{\hbar}}$$

$$\Rightarrow \dot{d}_m(t) = \sum_n V_{mn}(t) d_n(t) e^{i(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})t/\hbar} = \sum_n V_{mn}(t) d_n(t) e^{i\omega_{mn}t}$$

$$\Rightarrow i\hbar \dot{d}_m = \sum_n V_{mn}(t) d_n(t) \rightarrow \text{маленькая поправка}$$

Если есть гармоническое возмущение:

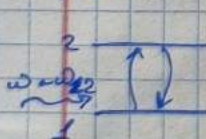
$$V_{mn} = F_{mn} e^{-i\omega t} + F_{nm}^* e^{i\omega t}$$

$$\Rightarrow \dot{d}_m = F_{mn} e^{i(\omega_{mn} - \omega)t} + F_{nm}^* e^{i(\omega_{mn} + \omega)t}$$

Если в нек. атомной системе будет в к-ом состоянии: $d_n(t=0) \neq 0$

$$\Rightarrow i\hbar \dot{d}_m = V_{mn} = F_{mn} e^{i(\omega_{mn} - \omega)t} + F_{nm}^* e^{i(\omega_{mn} + \omega)t}$$

и.д. резонанс $\Rightarrow d_{mx} = \frac{1}{i\hbar} \left[\frac{F_{mx} e^{i(\omega_{mx} - \omega)t}}{i(\omega_{mx} - \omega)} + \frac{F_{xm}^* e^{i(\omega_{mx} + \omega)t}}{i(\omega_{mx} + \omega)} \right]$



Допустим 2 уровня, для которых $\omega_{12} = \omega_2 - \omega_1 \sim \omega$

$$i\hbar \dot{d}_2 = [F_{21} e^{i(\omega_{21} - \omega)t} + F_{12}^* e^{i(\omega_{21} + \omega)t}] d_1$$

$$i\hbar \dot{d}_1 = [F_{12} e^{i(\omega_{12} - \omega)t} + F_{21}^* e^{i(\omega_{12} + \omega)t}] d_2$$

$$\omega \approx \omega_{21} + \epsilon$$

$$\omega = -\omega_{12} + \epsilon$$

$$\Rightarrow i\hbar \dot{d}_2 = F_{21} e^{-i\epsilon t} d_1$$

$$i\hbar \dot{d}_1 = F_{21}^* e^{i\epsilon t} d_2$$

Только те, кто может решать резонанс

решение в виде $d_2 = b_2 e^{-i\frac{\epsilon}{2}t}, d_1 = b_1 e^{i\frac{\epsilon}{2}t}$

$$\Rightarrow i\hbar \dot{b}_2 - i\hbar \frac{i\epsilon}{2} b_2 = F_{21} b_1$$

$$i\hbar \dot{b}_1 + i\hbar \frac{i\epsilon}{2} b_1 = F_{21}^* b_2$$

$$\Rightarrow b_1(t) = b_1 e^{i\omega t}$$

$$b_2(t) = b_2 e^{i\omega t}$$

$$\Rightarrow i\hbar [i\omega b_2 - \frac{i\epsilon}{2} b_2] = F_{21} b_1$$

$$i\hbar [i\omega b_1 + \frac{i\epsilon}{2} b_1] = F_{21}^* b_2 \rightarrow \text{дет=0}$$

$\Rightarrow |b_1|^2$ - вер-го предв-ия на 1-м уровне, $|b_2|^2$ - на втором

$$\begin{vmatrix} -\hbar\omega + \frac{e\hbar}{2} & -F_{21} \\ -F_{21}^* & -\hbar\omega - \frac{e\hbar}{2} \end{vmatrix} = -\left(\frac{e\hbar}{2} + \hbar\omega\right)\left(\frac{e\hbar}{2} - \hbar\omega\right) - |F_{21}|^2 = 0$$

$$-\left(\frac{e^2\hbar^2}{4} - \hbar^2\omega^2\right) - |F_{21}|^2 = 0 \Rightarrow \hbar^2\omega^2 - \frac{e^2\hbar^2}{4} - |F_{21}|^2 = 0 \quad / : \hbar^2$$

$$\omega_{1,2} = \pm \sqrt{\frac{e^2}{4} + \frac{|F_{21}|^2}{\hbar^2}} \sim \text{классическая Раджура.}$$

№2 $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{\tilde{e}^2}{r}$ пробная ф-я $\psi = A e^{-\frac{r}{a}}$

$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \dots$ $n=1 \rightarrow l=0$

Нормировка: $\int_0^\infty A^2 e^{-\frac{2r}{a}} r^2 dr = 1$

$\int_0^\infty e^{-\frac{2r}{a}} r^2 dr = \left\{ \begin{aligned} u=r^2 \rightarrow du=2rdr \\ dv=e^{-\frac{2r}{a}} \rightarrow v=-\frac{a}{2} e^{-\frac{2r}{a}} \end{aligned} \right\} = -\frac{a}{2} e^{-\frac{2r}{a}} r^2 \Big|_0^\infty + a \int_0^\infty e^{-\frac{2r}{a}} r dr =$

$= a \int_0^\infty e^{-\frac{2r}{a}} r dr = \left\{ \begin{aligned} u=r \rightarrow du=dr \end{aligned} \right\} = a - \frac{a}{2} e^{-\frac{2r}{a}} r \Big|_0^\infty + a^2 \frac{1}{2} \int_0^\infty e^{-\frac{2r}{a}} dr =$

$= \frac{a^2}{2} \cdot \left(-\frac{a}{2}\right) e^{-\frac{2r}{a}} \Big|_0^\infty = \frac{a^3}{4}$

$\Rightarrow A^2 \cdot \frac{a^3}{4} = 1 \rightarrow A = \frac{2}{a^{3/2}}$

$\langle \hat{p}_x \rangle = \int_0^\infty A^2 e^{-\frac{2r}{a}} \cdot \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right) \cdot \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} e^{-\frac{r}{a}} \right) r^2 dr = 0$

$\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} e^{-\frac{r}{a}} = \frac{\partial}{\partial r} r^2 \left(-\frac{1}{a} e^{-\frac{r}{a}}\right) = -\frac{1}{a} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 e^{-\frac{r}{a}}) = -\frac{1}{a} \left(2r e^{-\frac{r}{a}} - \frac{1}{a} r^2 e^{-\frac{r}{a}} \right)$

$\Rightarrow + \frac{\hbar^2}{2m} \cdot A^2 \cdot \frac{1}{a} \int_0^\infty e^{-\frac{2r}{a}} \left(2r e^{-\frac{r}{a}} - \frac{1}{a} r^2 e^{-\frac{r}{a}} \right) dr$

$2 \int_0^\infty e^{-\frac{2r}{a}} r dr = \left\{ \begin{aligned} u=r \rightarrow du=dr \\ dv=e^{-\frac{2r}{a}} \rightarrow v=-\frac{a}{2} e^{-\frac{2r}{a}} \end{aligned} \right\} = 2 \left[-\frac{a}{2} e^{-\frac{2r}{a}} r \Big|_0^\infty + \frac{a}{2} \int_0^\infty e^{-\frac{2r}{a}} dr \right] =$

$= a \cdot \frac{a}{2} = \frac{a^2}{2}$

$\frac{1}{a} \int_0^\infty e^{-\frac{2r}{a}} r^2 dr = \frac{1}{a} \cdot \frac{a^3}{4} = \frac{a^2}{4}$

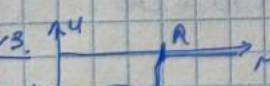
$\Rightarrow \langle \hat{p}_x \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{4}{a^3} \cdot \frac{1}{a} \cdot \left(\frac{a^2}{2} - \frac{a^2}{4} \right) = \frac{2\hbar^2}{m a^4} \cdot \frac{a^2}{4} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$

$\langle \hat{U}_e \rangle = A^2 \int_0^\infty e^{-\frac{2r}{a}} \cdot \left(-\frac{\tilde{e}^2}{r}\right) e^{-\frac{r}{a}} r^2 dr = -A^2 \tilde{e}^2 \int_0^\infty e^{-\frac{2r}{a}} r dr = -\frac{4}{a^3} \cdot \tilde{e}^2 \cdot \frac{a^2}{4} = -\frac{\tilde{e}^2}{a}$

$\Rightarrow \langle \hat{H}_a \rangle = \frac{\hbar^2}{2ma^2} - \frac{\tilde{e}^2}{a}$; $(\langle \hat{H}_a \rangle)' = -\frac{\hbar^2 \cdot 4mq}{4m^2 a^4} + \frac{\tilde{e}^2}{a^2} = 0$

$\frac{\tilde{e}^2 \cdot 4mq}{a^2} - \frac{\hbar^2}{m a^3} = 0 \quad ma\tilde{e}^2 = \hbar^2 \rightarrow a = \frac{\hbar^2}{m\tilde{e}^2}$

$\Rightarrow \langle \hat{H} \rangle = \frac{\hbar^2 \cdot m^2 \tilde{e}^4}{2m \cdot \hbar^4} - \frac{\tilde{e}^2 m \tilde{e}^2}{\hbar^2} = \frac{m \tilde{e}^4}{2m \hbar^2} - \frac{m \tilde{e}^4}{\hbar^2} = -\frac{m \tilde{e}^4}{2\hbar^2}$

№3  Пробная ф-я: $\psi(r) = \begin{cases} A \cos(\frac{\pi r}{2R}) & , r \leq R \\ 0 & , r > R \end{cases}$

Нормировка: $\int_0^R \int_0^{2\pi} A^2 \cos^2(\frac{\pi r}{2R}) \cdot r dr = 2\pi A^2 \int_0^R \frac{1 + \cos(\frac{\pi r}{R})}{2} r dr = 1$

$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) \right)$ $U = -U_0$

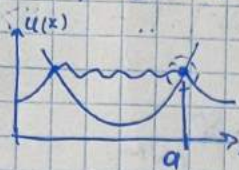
$\langle \hat{T} \rangle = 2\pi \int_0^R A^2 \cos(\frac{\pi r}{2R}) \cdot \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right) \cdot \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} \cos(\frac{\pi r}{2R})\right) r dr =$

$\langle \hat{U} \rangle = -2\pi A^2 U_0 \int_0^R \cos^2(\frac{\pi r}{2R}) r dr$

№2. Применения для квазиклассических зон:

$$i\hbar \hat{H} \psi = [\hat{H}^{(0)} + V(x, x)] \psi \quad \hat{H} \psi = E \psi \quad V(x) \text{ — медл.}$$

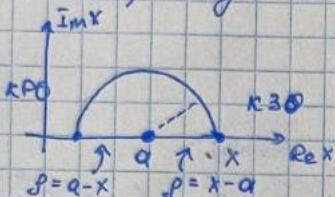
$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + u(x) \right] \psi = E \psi \rightarrow \psi = A(x) e^{i\theta(x)}$$



$$\Rightarrow \psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{\kappa}} e^{i \int \kappa dx} + \frac{C_2}{\sqrt{\kappa}} e^{-i \int \kappa dx} \quad \sim E > u \quad (\text{КРО})$$

$$\psi(x) = \frac{J_1}{\sqrt{\chi}} e^{\int \chi dx} + \frac{J_2}{\sqrt{\chi}} e^{-\int \chi dx} \quad \text{где } E < u \quad (\text{КЗО})$$

Применяем формулу точек поворота метод ВКБ к приложениям. Считаем решения, обходя точку по класс. м-ту.



$$u(x) \approx u(a) + u'(a) \cdot (x-a) = E + u'(a)(x-a)$$

$$\chi^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (u(a) + \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=a} (x-a) - E) \approx \chi(x-a)$$

$$\Rightarrow \psi'' - \chi(x-a)\psi = 0$$

$x > a$: в КЗО:

$$\int_a^x \chi(x-a)^{1/2} dx = \chi^{1/2} \int_a^x (x-a)^{1/2} dx = \frac{2}{3} \chi^{1/2} (x-a)^{3/2} \Rightarrow \sqrt{\chi} = \chi^{1/4} (x-a)^{1/4}$$

Решение справа от т. поворота:

$$\psi(x > a) = \frac{C_1}{\chi^{1/4} (x-a)^{1/4}} e^{-\frac{2}{3} \chi^{1/2} (x-a)^{3/2}}$$

Слева от точки поворота:

$$\psi = \frac{C_1}{\sqrt{\kappa(x)}} e^{i \int \kappa dx} + \frac{C_2}{\sqrt{\kappa(x)}} e^{-i \int \kappa dx}$$

$$\kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - u(a) - \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=a} (x-a)) = \chi(a-x)$$

$$\int_a^x \chi^{1/2} (a-x)^{1/2} dx = -\frac{2}{3} \chi^{1/2} (a-x)^{3/2}$$

$$\Rightarrow \psi(x < a) = \frac{C_1}{\chi^{1/4} (a-x)^{1/4}} e^{-i \frac{2}{3} \chi^{1/2} (a-x)^{3/2}} + \frac{C_2}{\chi^{1/4} (a-x)^{1/4}} e^{i \frac{2}{3} \chi^{1/2} (a-x)^{3/2}}$$

Нужно теперь посмотреть как трансформ. пол-м экзпоментов $\sim (x-a)^{3/2}$ при обходе точки поворота по и против часовой стрелки. К.к. переходим в точку поворота и преобразуем к полярным коорд:

$$(x-a) = \rho e^{i\theta} \rightarrow (x-a)^{3/2} = (\rho e^{i\theta})^{3/2}$$

$$(\rho e^{i\theta})^{3/2} = \rho^{3/2} e^{i\frac{3}{2}\theta} = -i(a-x)^{3/2}$$

В экспоненте:

$$(x-a)^{1/4} \rightarrow (e^{i\pi} (a-x))^{1/4} = (a-x)^{1/4} e^{i\frac{\pi}{4}}$$

т.е. при переходе КЗО $\rightarrow$ КРО

$$\frac{C_1}{\chi^{1/4} (x-a)^{1/4}} \rightarrow \frac{C_1}{\chi^{1/4} (a-x)^{1/4} e^{i\frac{\pi}{4}}} \Rightarrow C_1 = d e^{i\frac{\pi}{4}}$$

Обойдем контур по часовой стрелке (анти-к-вращ.):

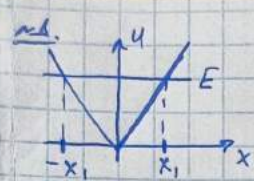
$$(x-a)^{1/4} \rightarrow (e^{-i\pi} (a-x))^{1/4} = e^{-i\frac{\pi}{4}} (a-x)^{1/4}$$

$$\frac{C_2}{\chi^{1/4} (x-a)^{1/4}} \rightarrow \frac{C_2}{\chi^{1/4} (a-x)^{1/4} e^{-i\frac{\pi}{4}}} \Rightarrow C_2 = d e^{-i\frac{\pi}{4}}$$

В.ф. в КРО:

$$\psi(x < a) = \frac{d}{\chi^{1/4} (a-x)^{1/4}} e^{-\frac{2}{3} i \chi^{1/2} (a-x)^{3/2} + i\frac{\pi}{4}} + \frac{d}{\chi^{1/4} (a-x)^{1/4}} e^{\frac{2}{3} i \chi^{1/2} (a-x)^{3/2} - i\frac{\pi}{4}}$$

Разность фаз между нар. и сар: $-\frac{\pi}{4} - \frac{\pi}{4} = -\frac{\pi}{2} \rightarrow$ сдвиг на $\frac{\pi}{2}$.



$U(x) = K|x|$ Спектр разреш. значений в яме гравит.

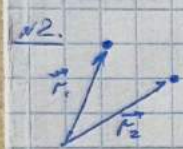
$$E = \frac{p^2}{2m} + U(x) \rightarrow p = \sqrt{2m(E - U(x))} = \sqrt{2m(E - K|x|)}$$

Уравнение Бора - Sommerfelda:

$$\int_{-x_1}^{x_1} p(x) dx = \pi \hbar (n - \frac{1}{2}) \quad \text{~ гравит. нис. параболы$$

$$E = U(x_1) = Kx_1 \Rightarrow x_1 = \frac{E}{K}$$

$$\begin{aligned} \int_{-x_1}^{x_1} p(x) dx &= \int_{-\frac{E}{K}}^{\frac{E}{K}} \sqrt{2m(E - K|x|)} dx = 2 \int_0^{\frac{E}{K}} \sqrt{2m(E - Kx)} dx = \\ &= 2 \int_0^{\frac{E}{K}} \sqrt{2mE - 2mKx} dx = 2 \cdot \sqrt{2m} \cdot \left(-\frac{1}{K}\right) (E - Kx)^{\frac{3}{2}} \cdot \frac{2}{3} \Big|_0^{\frac{E}{K}} = \pi \hbar (n - \frac{1}{2}) \\ \Rightarrow (E - Kx)^{\frac{3}{2}} \Big|_0^{\frac{E}{K}} &= (E - E)^{\frac{3}{2}} - E^{\frac{3}{2}} = -E^{\frac{3}{2}} \quad \frac{2\sqrt{2m}}{K} \cdot \frac{2}{3} \cdot E^{\frac{3}{2}} = \pi \hbar (n - \frac{1}{2}) \\ \Rightarrow E_n &= \left[\frac{3}{4} \frac{K}{\sqrt{2m}} \pi \hbar (n - \frac{1}{2}) \right]^{\frac{2}{3}} \end{aligned}$$



$$U(r) = -\frac{e^2}{r} = -\frac{\tilde{e}^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \Rightarrow \hat{H}\psi = E\psi$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_{r_1} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_{r_2} + U(r) \right] \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

$\Rightarrow$ Можно перейти на движение центра масс и движение частицы относительно центра масс.

$$\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}; \quad M = m_1 + m_2; \quad \frac{1}{m} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$$

$$x_i = x_{1i} - x_{2i}; \quad \tilde{x}_i = \frac{m_1 x_{1i} + m_2 x_{2i}}{m_1 + m_2} \rightarrow \text{как выбрать?}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_{ij}} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial x_{ij}} + \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial x_{ij}} \rightarrow \frac{\partial}{\partial x_{ij}} \\ \Rightarrow \frac{\partial x_i}{\partial x_{ij}} &= \delta_{ij}; \quad \frac{\partial x_i}{\partial x_{ej}} = -\delta_{ij}; \quad \frac{\partial x_i}{\partial x_{ij}} = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \delta_{ij}; \quad \frac{\partial x_i}{\partial x_{ij}} = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \delta_{ij} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta_{x_1} &= \sum_i \frac{\partial^2}{\partial x_{1i}^2} = \sum_i \left(\frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial x_i} \right)^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{2m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{m_1^2}{(m_1 + m_2)^2} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \\ \Delta_{x_2} &= \sum_i \frac{\partial^2}{\partial x_{2i}^2} = \sum_i \left(-\frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial x_i} \right)^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} - \frac{2m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{m_2^2}{(m_1 + m_2)^2} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_{x_1} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_{x_2} &= -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{2}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{1}{m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} - \frac{2}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \right) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{1}{m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{1}{m_1 + m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \right) \equiv -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_r - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_R \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_R - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta_r + U(\vec{r}) \right] \psi(\vec{R}, \vec{r}) = E \psi(\vec{R}, \vec{r})$$

Можно разнести переменные: $\psi(\vec{R}, \vec{r}) = e^{-i\vec{k}\vec{R}} \psi(\vec{r})$

$$\Rightarrow +\frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \psi(\vec{r}) + \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_r + U(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

$$\Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_r + U(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E_{\text{new}} \psi(\vec{r}) \quad \Rightarrow E_{\text{new}} = E - \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$$

$$13. \vec{E} = \vec{E}_0 e^{-\frac{t}{\tau}}$$

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2 \vec{L}^2}{2I} - (\vec{p}, \vec{E}) = -\frac{\hbar^2 \vec{L}^2}{2I} - E p \cos \varphi \quad | \quad \vec{L} = \omega r^2$$

$$\psi_{\text{ст.}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}; \quad \psi_{\text{ст.}} = \sum_m C_m e^{im\varphi}$$

из рекурр. соотношений:

$$i\hbar \dot{C}_m(t) = \sum_n \hat{V}_{mn}(t) C_n(t)$$

$$\hat{V}_{mn}(t) = V_{mn} e^{i \frac{(E_m - E_n^0)}{\hbar} t}$$

$$-\frac{\hbar^2 m^2}{2I r^2} = E_m \Rightarrow E_m^0 - E_n^0 = \frac{\hbar^2}{2I r^2} (m^2 - n^2)$$

$$V_{mn} = -\frac{p}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-im\varphi} \rho(t) \cos \varphi e^{in\varphi} d\varphi = \left\{ \text{если } n = m \pm 1 \right\} =$$

$$= -\frac{p}{2\pi} \rho(t) \int_0^{2\pi} e^{-i(n \pm 1)\varphi} \cos \varphi e^{in\varphi} d\varphi = -\frac{p}{2\pi} \rho(t) \left[\int_0^{2\pi} \cos^2 \varphi d\varphi \pm i \int_0^{2\pi} \sin \varphi \cos \varphi d\varphi \right] =$$

$$= -\frac{p \rho(t)}{2} \quad \begin{matrix} = \pi \\ = 0 \end{matrix}$$

Можно сказать, что через угловую переносимость не можно!

$$\Rightarrow |C_m^{(1)}|^2 = \frac{p^2}{4\hbar^2} \cdot \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(t) e^{i\omega_{mn}t} dt \right|^2$$

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_0 e^{-\frac{t}{\tau}} e^{-\frac{t}{\tau}} e^{i\omega_{mn}t} dt = \int_{-\infty}^0 \rho_0 e^{\frac{t}{\tau}} e^{i\omega_{mn}t} dt + \int_0^{+\infty} \rho_0 e^{-\frac{t}{\tau}} e^{i\omega_{mn}t} dt =$$

$$= \rho_0 \left[\frac{1}{\frac{1}{\tau} + i\omega_{mn}} - \frac{1}{-\frac{1}{\tau} + i\omega_{mn}} \right] = \rho_0 \left[\frac{-\frac{1}{\tau} + i\omega_{mn}}{-\omega_{mn}^2 - \frac{1}{\tau^2}} - \frac{\frac{1}{\tau} - i\omega_{mn}}{-\omega_{mn}^2 - \frac{1}{\tau^2}} \right] =$$

$$= 2\rho_0 \cdot \left[\frac{1}{\tau(\omega_{mn}^2 + \frac{1}{\tau^2})} \right] = \frac{2\rho_0 \tau}{\omega_{mn}^2 \tau^2 + 1}$$

$$\Rightarrow |C_m^{(1)}|^2 = \frac{p^2}{4\hbar^2} \cdot \left[\frac{2\rho_0 \tau}{\omega_{mn}^2 \tau^2 + 1} \right]^2$$

н3.

Эрмитовы операторы ($\hat{L} = \hat{L}^\dagger = \hat{L}^{T*}$) $\rightarrow$ у них действ. значения и матрица такого оператора может быть приведена к диаг. виду $\rightarrow$ через собств. значения.

$$\hat{L} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}; \hat{L} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

21

След матрицы и её определитель инвариантны относительно унитарных преобразований:

$$\begin{cases} \text{Sp } \hat{L} = a + d = \lambda_1 + \lambda_2 \\ \det \hat{L} = ad - bc = \lambda_1 \lambda_2 \end{cases} \quad \hat{L} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix}^* = \begin{pmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{pmatrix} = \hat{L}^\dagger$$

$$\Rightarrow a = a^*, d = d^* \rightarrow \text{действ.}$$

$$\begin{cases} a + d = \lambda_1 + \lambda_2 \\ ad - |b|^2 = \lambda_1 \lambda_2 \end{cases}$$

$$\begin{cases} b = c^* \\ c = b^* \end{cases}$$

$$\lambda_1 = a + d - \lambda_2$$

$$ad - |b|^2 = (a + d - \lambda_2) \lambda_2 \rightarrow -\lambda_2^2 + \lambda_2(a + d) \pm ad - |b|^2 = 0$$

$$\lambda_2^2 - \lambda_2(a + d) + (ad - |b|^2) = 0$$

$$\Rightarrow \lambda_2 = \frac{a + d}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{a + d}{2}\right)^2 - (ad - |b|^2)} = \frac{a + d}{2} \pm \sqrt{\frac{(a - d)^2}{4} + |b|^2}$$

$$\lambda_2 = a + d - \lambda_1 \rightarrow \lambda_1 = \frac{a + d}{2} \mp \sqrt{\frac{(a - d)^2}{4} + |b|^2}$$

н2. Аналогия ШУ вида:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = [H^0 + V(x, x)] \psi, \text{ где } V - \text{возмущение, мнж. ф.-а.}$$

$u(x)$

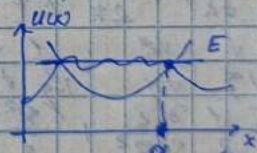
$$H^0 \psi = E \psi; \text{ в КРО: } E > u \rightarrow \psi_{K\alpha} + \kappa^2(x) \psi = 0, \text{ где } \kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} [E - u(x)]$$

$$\text{в КЗО: } E < u \rightarrow \psi_{K\alpha} - \kappa^2(x) \psi = 0, \text{ где } \kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} [u(x) - E]$$

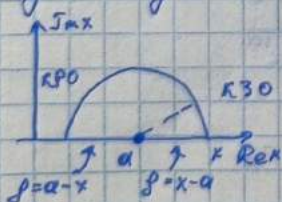
$\Rightarrow$ ищем решение в виде $\psi = A(x) e^{i\theta(x)} \rightarrow$ преобр. $A'' \rightarrow$ в итоге

$$(KPO) \quad \psi(x) = \frac{c_1}{\sqrt{\kappa}} e^{i \int \kappa dx} + \frac{c_2}{\sqrt{\kappa}} e^{-i \int \kappa dx}, \quad E > u$$

$$(KZO) \quad \psi(x) = \frac{d_1}{\sqrt{\kappa}} e^{\int \kappa dx} + \frac{d_2}{\sqrt{\kappa}} e^{-\int \kappa dx}, \quad E < u$$



Вблизи точек поворота метод ВКБ не применим. Связываем решения, обходя точку по конт. пл-ти.



$$u(x) \approx u(a) + u'(a) \cdot (x - a) = E + u'(a)(x - a)$$

$$\kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} \left(u(a) + \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=a} (x - a) - E \right) \approx \chi(x - a)$$

$$\Rightarrow \psi'' - \chi(x - a) \psi = 0$$

$$\text{в КЗЗ } x \gg a: \int \chi(x - a) dx = \chi^{1/2} \int (x - a)^{1/2} dx = \frac{2}{3} \chi^{1/2} (x - a)^{3/2} \Rightarrow \sqrt{\kappa} = \chi^{1/4} (x - a)^{3/4}$$

Решение справа от т. поворота:

$$\psi(x > a) = \chi^{1/4} (x - a)^{3/4} e^{-\frac{2}{3} \chi^{1/2} (x - a)^{3/2}}$$

Связь от точки поворота:

$$\psi = \frac{c_1}{\sqrt{\kappa(x)}} e^{i \int \kappa dx} + \frac{c_2}{\sqrt{\kappa(x)}} e^{-i \int \kappa dx}$$

$$\kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - u(a) - \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=a} (x - a)) = \chi(a - x)$$

$$\int_0^x \chi^{1/2} (a-x)^{1/2} dx = -\frac{2}{3} \chi^{1/2} (a-x)^{3/2} + \frac{c_2}{\chi^{1/4} (a-x)^{1/4}} e^{-i\frac{2}{3} \chi^{1/2} (a-x)^{3/2}}$$

$$\rightarrow \psi(x < a) = \frac{c_1}{\chi^{1/4} (a-x)^{1/4}} e^{-i\frac{2}{3} \chi^{1/2} (a-x)^{3/2}} + \frac{c_2}{\chi^{1/4} (a-x)^{1/4}} e^{i\frac{2}{3} \chi^{1/2} (a-x)^{3/2}}$$

Нужно теперь посмотреть как преобр. показатель экспоненты $\sim (x-a)^{3/4}$ ближе точки поворота по и преобр. кассовой энергии. Н.с. помещены в точку поворота и преобр. к полярным коорд.

$$(x-a) = r e^{i\theta} \rightarrow (x-a)^{3/2} = (r e^{i\theta})^{3/2}$$

$$(r e^{i\theta})^{3/2} = r^{3/2} e^{i\frac{3}{2}\theta} e^{i\frac{\pi}{2}} = -i(a-x)^{3/2} \rightarrow \text{фаза преобр. как нуля.}$$

В знаменателе:

$$(x-a)^{1/4} \rightarrow (e^{i\pi} (a-x))^{1/4} = (a-x)^{1/4} e^{i\frac{\pi}{4}}$$

$$\frac{d}{\chi^{1/4} (x-a)^{1/4}} \rightarrow \frac{c_1}{\chi^{1/4} (a-x)^{1/4} e^{i\frac{\pi}{4}}} \Rightarrow c_1 = d e^{i\frac{\pi}{4}}$$

Оборачив по кассовой энергии (отсюда в-спин.)

$$(x-a)^{1/4} \rightarrow (e^{-i\pi} (a-x))^{1/4} = e^{-i\frac{\pi}{4}} (a-x)^{1/4}$$

$$\frac{d}{\chi^{1/4} (x-a)^{1/4}} \rightarrow \frac{c_2}{\chi^{1/4} (a-x)^{1/4} e^{-i\frac{\pi}{4}}} \Rightarrow c_2 = d e^{-i\frac{\pi}{4}}$$

В.ф. в КРО:

$$\psi(x < a) = \frac{d}{\chi^{1/4} (a-x)^{1/4}} e^{-i\frac{2}{3} \chi^{1/2} (a-x)^{3/2} + i\frac{\pi}{4}} + \frac{d}{\chi^{1/4} (a-x)^{1/4}} e^{i\frac{2}{3} \chi^{1/2} (a-x)^{3/2} - i\frac{\pi}{4}}$$

н.з. Заполненный осциллятор? $\hat{V} = -\tilde{e} \hat{\phi} x$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \psi = E \psi \quad / \cdot \frac{1}{\hbar\omega} \rightarrow E = \frac{E}{\hbar\omega} \rightarrow \text{обезразличиваем}$$

$$\frac{\hbar}{2m\omega} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \psi = \epsilon \psi \quad x = \frac{x}{l_g} \quad \text{где } l_g = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

$$\frac{d}{dx} = \frac{d}{d\frac{x}{l_g}} \frac{dx}{d\frac{x}{l_g}} = l_g \frac{d}{d\frac{x}{l_g}}$$

$$\Rightarrow \left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\frac{x}{l_g}^2} + \frac{1}{2} \left(\frac{x}{l_g}\right)^2 \right] \psi = \epsilon \psi \rightarrow \epsilon = \frac{\alpha + \alpha^*}{\sqrt{2}} \quad \rho = \frac{\alpha - \alpha^*}{i\sqrt{2}} = -i\frac{\alpha}{\sqrt{2}}$$

$$\hat{V} = -\tilde{e} \hat{\phi} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \cdot \frac{\alpha + \alpha^*}{\sqrt{2}} = -\tilde{e} \hat{\phi} \sqrt{\frac{\hbar}{4m\omega}} \cdot (\alpha + \alpha^*)$$

из теории возмущений: $E \approx E^{(0)} + V_{nn} + \sum_{k \neq n} \frac{|V_{nk}|^2}{E_n - E_k^{(0)}}$

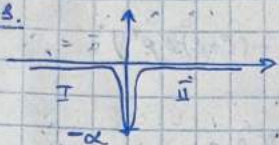
$$V_{nn} = \alpha \cdot \langle n | (\alpha + \alpha^*) | n \rangle = \alpha [\langle n | \alpha | n \rangle + \langle n | \alpha^* | n \rangle] = 0$$

$$V_{kn} = \langle n | \hat{V} | k \rangle = -\tilde{e} \hat{\phi} \sqrt{\frac{\hbar}{4m\omega}} \cdot [\langle n | \hat{a} | k \rangle + \langle n | \hat{a}^* | k \rangle] =$$

$$= -\tilde{e} \hat{\phi} \sqrt{\frac{\hbar}{4m\omega}} \cdot [\langle n | \sqrt{k} | k-1 \rangle + \langle n | \sqrt{k+1} | k+1 \rangle] =$$

$$= -\tilde{e} \hat{\phi} \sqrt{\frac{\hbar}{4m\omega}} \cdot \sqrt{k} \cdot \delta_{n,k-1} - \tilde{e} \hat{\phi} \sqrt{\frac{\hbar}{4m\omega}} \cdot \sqrt{k+1} \cdot \delta_{n,k+1}$$

23.



$$\hat{H}\psi = E\psi$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} - \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = 0$$

$$\Rightarrow \psi_I = C_1 e^{\kappa x} ; \psi_{II} = C_2 e^{-\kappa x}$$

ГЧ с δ -функцией: $\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$

$$\left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{x=0} - \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{x=0} = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(0)$$

$$\Rightarrow \begin{cases} C_1 = C_2 = C \\ -\kappa C - \kappa C = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} C \Rightarrow -2\kappa = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \Rightarrow \kappa = \frac{m\alpha}{\hbar^2} \Rightarrow \frac{2m|E|}{\hbar^2} = \frac{m^2 \alpha^2}{\hbar^4} \end{cases}$$

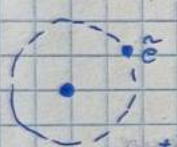
$$\Rightarrow |E| = \frac{\alpha^2 m}{2\hbar^2} \Rightarrow E_0 = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \text{ - одно состояние!}$$

Нормировка:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = C^2 \left[\int_{-\infty}^0 e^{2\kappa x} dx + \int_0^{\infty} e^{-2\kappa x} dx \right] = C^2 \left[\frac{1}{2\kappa} + \frac{1}{2\kappa} \right] = \frac{C^2}{\kappa} = 1 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow C = \sqrt{\kappa} \Rightarrow \psi = \sqrt{\kappa} e^{-\kappa|x|}$$

НР. Полюс Вавилова преобразованием гравитационного поля.



$$V(r) = -\frac{e^2}{r} \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \quad (\text{в СИ})$$

$$\hat{H}\psi = E\psi ; \psi(\vec{r}) = R(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi) \sim \text{сферические гармоники}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R = E R$$

$$R(r) = \frac{u(r)}{r}$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2} \right] u = -|E| u$$

Обозначим: $\kappa = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} ; \rho = \kappa r$

$$\frac{d}{dr} = \frac{d\rho}{dr} \cdot \frac{dr}{d\rho} = \kappa \frac{d}{d\rho} ; \frac{d^2}{dr^2} = \frac{d}{d\rho} \left(\kappa \frac{d}{d\rho} \right) = \kappa^2 \frac{d^2}{d\rho^2}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m|E|} \frac{d^2 u}{d\rho^2} + \left[-\frac{e^2}{2m\hbar^2 |E|} \frac{1}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u = -u$$

$$-\frac{1}{\rho^2} \frac{d^2 u}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho^2} \left[-\frac{e^2 2m}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u = -u$$

$$-\frac{d^2 u}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho^2} \left[-\frac{2m e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u = -u$$

$$\text{III } \rho_0 = \frac{m e^2}{2\epsilon_0 \hbar^2 \kappa}$$

$$\Rightarrow \frac{d^2 u}{d\rho^2} = \left[\frac{1}{\rho} - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^3} \right] u$$

Сферическая асимптотика $u(\rho)$: $\rho \rightarrow \infty \Rightarrow \frac{d^2 u}{d\rho^2} = u \Rightarrow u = A e^{\rho} + B e^{-\rho}$

$$\rho \rightarrow 0: \frac{d^2 u}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} u = 0 \quad \alpha = \rho^{\lambda}$$

$$\Rightarrow \lambda(\lambda-1) \rho^{\lambda-2} - l(l+1) \rho^{\lambda-2} = 0 \Rightarrow \lambda(\lambda-1) = l(l+1) \\ \lambda_1 = l+1 ; \lambda_2 = -l \text{ - в о/ах сг/ах}$$

$$u = v(\rho) e^{-\rho} \rho^{\lambda}$$

$$\frac{d\psi}{dr} = v' e^{-f} r^{l+1} - v e^{-f} r^{l+1} + (l+1) v e^{-f} r^l = e^{-f} (v' r^{l+1} - v r^{l+1} + (l+1) v r^l)$$

$$\frac{d^2\psi}{dr^2} = -e^{-f} (v' r^{l+1} - v r^{l+1} + (l+1) v r^l) + e^{-f} (v'' r^{l+1} + (l+1) v' r^l - v' r^{l+1} - (l+1) v r^l + (l+1) v' r^l + (l+1) l v r^{l-1})$$

$$0 = e^{-f} (-v' r^{l+1} + v r^{l+1} - (l+1) v r^l + v'' r^{l+1} + (l+1) v' r^l - v' r^{l+1} - (l+1) v r^l + (l+1) v' r^l + (l+1) l v r^{l-1})$$

$$\Rightarrow \int v'' + v' [-2r + 2l + 2] + v [-2l - 2] + f_0 v = 0$$

$$\psi(r) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j r^j$$

$$r \cdot \sum_{j=0}^{\infty} j(j-1) c_j r^{j-2} + [-2r + 2l + 2] \sum_{j=0}^{\infty} j c_j r^{j-1} + [f_0 - 2l - 2] \sum_{j=0}^{\infty} c_j r^j = 0$$

$$r \sum_{j=0}^{\infty} j(j+1) c_{j+1} r^{j-1} + [-2r + 2l + 2] \sum_{j=0}^{\infty} (j+1) c_{j+1} r^j + [f_0 - 2l - 2] \sum_{j=0}^{\infty} c_j r^j = 0$$

$$j(j+1) c_{j+1} + 2c_{j+1} (j+1)(l+1) - 2c_j j + c_j (-2l - 2 + f_0) = 0$$

$$\Rightarrow c_{j+1} [j(j+1) + 2(l+1)(j+1)] + c_j (-2j - 2l - 2 + f_0) = 0$$

Рекуррентное соотношение:

$$c_{j+1} = - \frac{c_j (-2j - 2l - 2 + f_0)}{(j+1)(j+2(l+1))}$$

Решение должно сфериноваться: $2j + 2l + 2 = f_0 \Rightarrow f_0 = 2n$ - г.д. целым.

$$f_0 = \frac{\tilde{e}^2 n}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2}; \quad \mathcal{E} = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$$

$$\Rightarrow E_n = - \left[\frac{n}{2\hbar^2} \left(\frac{\tilde{e}^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \right] \cdot \frac{1}{n^2} = - \frac{E_1}{n^2}$$

Общее решение $\psi(r)$ выражается через полиномы Лагерра. Зав. числа: n, m, l , тут всего одно $\rightarrow n \rightarrow$ по $l < n$ - вырождение.

1. $\hat{H}\psi = E\psi$ где $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$
 $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \psi = E\psi \quad | : \frac{1}{\hbar\omega} \quad \varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega} \quad \xi = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} x \quad p_\xi = \sqrt{\hbar m\omega} p$
 $\frac{d}{dx} = \frac{d}{d\xi} \cdot \frac{d\xi}{dx} = \frac{1}{\xi} \frac{d}{d\xi} \Rightarrow \left[\frac{p_\xi^2}{2} + \xi^2 \right] \psi(\xi) = \varepsilon \psi(\xi)$

Вводим операторы: $\hat{\alpha} = \frac{\hat{a} + \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}}; \hat{\beta} = \frac{\hat{a} - \hat{a}^\dagger}{i\sqrt{2}}$

$\hat{\alpha}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \sim \text{оператор уничтожения}$
 $\hat{\alpha}^\dagger|n-1\rangle = \sqrt{n}|n\rangle \sim \text{оператор рождения}$

$\hat{\alpha}\hat{\beta} - \hat{\beta}\hat{\alpha} = -i \Rightarrow \hat{\alpha}\hat{\alpha}^\dagger - \hat{\alpha}^\dagger\hat{\alpha} = 1$

$\hat{H} = \frac{1}{2} \left[\frac{-(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)(\hat{a} - \hat{a}^\dagger) + (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)}{2} \right] = \frac{\hat{\alpha}\hat{\alpha}^\dagger + \hat{\alpha}^\dagger\hat{\alpha}}{2} = \frac{\hat{\alpha}\hat{\alpha}^\dagger + 1}{2}$

$\Rightarrow (\hat{\alpha}^\dagger\hat{\alpha} + \frac{1}{2})\psi = \varepsilon\psi \Rightarrow \hat{\alpha}^\dagger\hat{\alpha}\psi = (\varepsilon - \frac{1}{2})\psi \quad \alpha = \varepsilon - \frac{1}{2}$

$\begin{cases} \hat{a} + \hat{a}^\dagger = \sqrt{2} \hat{\alpha} \\ \hat{a} - \hat{a}^\dagger = i\sqrt{2} \hat{\beta} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \hat{a} = \frac{\hat{\alpha} + i\hat{\beta}}{\sqrt{2}} \\ \hat{a}^\dagger = \frac{\hat{\alpha} - i\hat{\beta}}{\sqrt{2}} \end{cases}$
 $\hat{\alpha} = \hat{\beta}; \hat{\beta} = -i\hat{\alpha}$

В основном состоянии: $\hat{\alpha}|0\rangle = 0 \leftarrow \text{равно нулю}$

$\left(\frac{\hat{\alpha} + i\hat{\beta}}{\sqrt{2}} \right) \psi_0(\xi) = 0 \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \psi_0(\xi) = 0$

$\xi\psi + \frac{\partial\psi}{\partial\xi} = 0 \Rightarrow \xi + \frac{\partial}{\partial\xi} = -\frac{\partial}{\partial\xi} \Rightarrow \psi_0 = C_1 e^{-\frac{\xi^2}{2}}$

Нормировка: $\int_{-\infty}^{+\infty} C_1^2 e^{-\xi^2} d\xi = C_1^2 \sqrt{\pi} = 1 \Rightarrow \psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{\xi^2}{2}}$

Первое возбужденное:

$\hat{\alpha}^\dagger|0\rangle = |1\rangle \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\xi}{\sqrt{2}} - \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{\xi^2}{2}} = \psi_1(\xi)$

$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}} + \xi e^{-\frac{\xi^2}{2}} \right) = \psi_1(\xi) \Rightarrow \psi_1(\xi) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \xi e^{-\frac{\xi^2}{2}}$

12. В сферич. е.к. импульс можно записать:

$\hat{p}^2 = -\hbar^2 \Delta$ где $\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{L}^2}{r^2}$

$\Rightarrow \hat{H}\psi = E\psi \Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\hat{L}^2}{r^2} + U(r) \right] \psi = E\psi$

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

где решение $\psi(\vec{r}) = R(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ — сферические гармоники

$R_{E,l}(r) \sim$ Если у частицы есть импульс и потенциал не зависит от r — тогда будет как-то двигаться в каком-то направлении.

Зав. числа: l — орбитальное к.в. число, m — магн. Но m важно не, т.к. ось z можем повернуть как угодно.

$U(r) = 0$

$\Rightarrow \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right] R_{E,l}(r) = 0$

Если $l=0$: $(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + k^2) R_{l,0}(r) = 0$ — решение в виде сферич. волн.

$R = \frac{e^{\pm ikr}}{r}$ — функция при $r=0$ особенность осевая — не подходит

$\Rightarrow R = \frac{\sin kr}{r}$ — при $r \rightarrow \infty$

Если $l \neq 0$, при $r \rightarrow 0$ будет преобладать $\frac{l(l+1)}{r^2}$, тогда
 $\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial R}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} R = 0$ — уравн. Эйлера.

$R(r) = r^{\nu} \rightarrow \frac{\partial R}{\partial r} \sim \nu r^{\nu-1}$; $r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \sim \nu r^{\nu+1}$

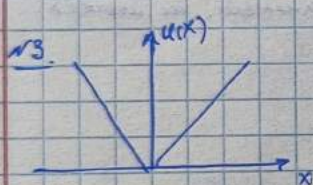
$\nu(\nu+1)r^{\nu} - l(l+1)r^{\nu} = 0 \Rightarrow \nu(\nu+1) - l(l+1) = 0 \rightarrow \nu_1 = l$
 $\nu_2 = -l-1 \rightarrow$ не м.д.

$\Rightarrow R(r \rightarrow 0) = C_1 r^l$

А как бесконечности раскрывается как сферическая волна, так можно преобразить $\frac{l(l+1)}{r^2}$

В общем случае:

$[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2] R_{l,e}(r) = 0$ — уравн. сферических ф-ий Бесселя.

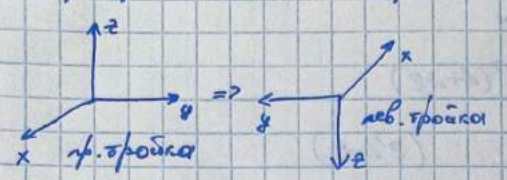


$$\psi(x) = \chi(x); \quad \psi(x) = A e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}$$

Нормировка: $A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = A^2 \cdot \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = 1. \Rightarrow A^2 = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}$

$$\langle \psi | \psi \rangle = A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \chi(x) \chi(x) dx = A^2 \chi \left[\int_0^{+\infty} x e^{\alpha x^2} dx + \int_{-\infty}^0 (-x) e^{-\alpha x^2} dx \right] =$$

11. Оператор четности = инверсия $\rightarrow$ инверсия координатных осей.



$$\hat{P}\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r})$$

$$\hat{P}^2\psi = P^2\psi = \psi \rightarrow P = \pm 1$$

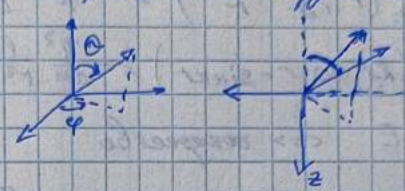
$$\hat{P}\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r}) \rightarrow \text{ор.-я четность}$$

$$\psi(\vec{r}) = -\psi(-\vec{r}) \rightarrow \text{ор.-я нечетность}$$

$\hat{P}$ и $\hat{H}$ коммутируют $\rightarrow$ закон сохр. четности - если замкнутой системы
абс. ор.-я четность $\rightarrow$ то четность сохраняется во времени.

$\hat{P}$ и $\hat{L}$ $\rightarrow$ тоже коммутируют, т.к. произв. по коорд. тоже коммутирует

Сфер. с.к.: $\psi = \sum R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$



Для такой системы четность Y_{lm}
определяется квант. числами:

$$P = (-1)^l \rightarrow l - \text{четн} \rightarrow \text{сов. четн.}$$

$$l - \text{нечетн} \rightarrow \text{сов. нечетн.}$$

$r \rightarrow r; \theta \rightarrow \pi - \theta; \varphi \rightarrow \varphi + \pi$

12. $\hat{H}\psi = E\psi$, где $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{m\omega_x^2 x^2}{2} + \frac{m\omega_y^2 y^2}{2}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \psi(x, y) + \frac{1}{2} m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2) \psi(x, y) = E \psi(x, y)$$

Метод разделения переменных: $\psi(x, y) = \psi_x(x) \psi_y(y)$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi_y}{\psi_y} \frac{\psi_x''}{\psi_x} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi_x}{\psi_x} \frac{\psi_y''}{\psi_y} + \frac{1}{2} m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2) \frac{\psi_x}{\psi_x} \frac{\psi_y}{\psi_y} = E \frac{\psi_x}{\psi_x} \frac{\psi_y}{\psi_y} \quad / : \frac{\psi_x}{\psi_x} \frac{\psi_y}{\psi_y}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi_x''}{\psi_x} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi_y''}{\psi_y} + \frac{1}{2} m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2) = E, \quad E = E_x + E_y \text{ — разделим}$$

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi_x''}{\psi_x} + \frac{1}{2} m\omega_x^2 x^2 \psi_x = E_x \psi_x \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi_y''}{\psi_y} + \frac{1}{2} m\omega_y^2 y^2 \psi_y = E_y \psi_y \end{cases} \rightarrow \text{Два осциллятора — для каждого ур-е Эрмита}$$

$$\psi = \psi_x \psi_y = H_{n_x} \left(\frac{x}{\ell_x} \right) H_{n_y} \left(\frac{y}{\ell_y} \right) e^{-\frac{x^2+y^2}{2\ell_x^2\ell_y^2}} \quad \text{где } \ell_x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_x}}$$

Для одного осциллятора: $E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$

$$\Rightarrow E = E_x + E_y = \hbar\omega (n_x + n_y + 1) \rightarrow \text{это вырождение (связано с некоторой симметрией)}$$

13. $u(x, y, z) = \begin{cases} 0, & \frac{x^2+y^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2} < 1 \\ \infty, & \frac{x^2+y^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2} > 1 \end{cases}$ $\frac{a-b}{a} \ll 1 \Rightarrow (a-b) \ll a$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + u(x, y, z) \right] \psi = E\psi$$

$$z' = \frac{a}{b} z \rightarrow z = \frac{b}{a} z' \rightarrow \text{координ. свести к сфере}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi = E\psi \quad U=0 \text{ внутри}$$

$$a-b = a' \rightarrow a(1-\epsilon) = b' \rightarrow a' = (1-\epsilon)^2 \approx b'(1+2\epsilon)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z'^2} \right) - \frac{2\epsilon\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z'^2} \right] \psi = E\psi \quad (z' \equiv z)$$

$$V = -\frac{2\epsilon\hbar^2}{m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \rightarrow \text{расщепление на вырождение}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi = E\psi, \quad l=0$$

$$\psi(r) = \frac{u(r)}{r} \rightarrow u(r) = \sin(\kappa r), \quad \kappa^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Как в ДГ сферич. волн

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \frac{\sin \kappa r}{r} \right) = \frac{\sin \kappa r}{r} E$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (2r \cos \kappa r - \sin \kappa r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} (-\kappa^2 r \sin \kappa r) = \frac{\sin \kappa r}{r} E$$

$$\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = E \Leftrightarrow \text{соответство}$$

$$rR: \sin(\kappa a) = 0 \rightarrow \kappa a = \pi n \Rightarrow E_0^{(0)} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

Нормировка:

$$\int_0^a \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^2 A^2 \cdot \frac{1}{r^2} \sin^2\left(\frac{\pi r}{a}\right) \sin\theta + \cos\phi dr d\theta d\phi = 2\pi A^2 \cdot 2 \int_0^a \frac{1 - \cos\left(\frac{2\pi r}{a}\right)}{2} dr =$$

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

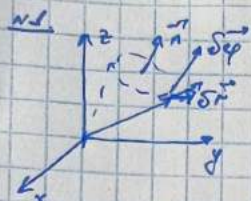
$$\psi_0(r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \frac{1}{r} \sin\left(\frac{\pi r}{a}\right)$$

$$E_0^{(0)} \equiv V_{00} = 4\pi \int_0^a \frac{1}{r} \sin\left(\frac{\pi r}{a}\right) \cdot \left(-\frac{\epsilon\hbar^2}{m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \cdot \frac{1}{r} \sin\left(\frac{\pi r}{a}\right) \right) dr \cdot A^2 \cdot r^2$$

из теоремы Грина.

$$\text{всё симметрично} \quad \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{1}{3} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$$

$$\Rightarrow E_0^{(1)} = \frac{2}{a} \left(-\frac{\epsilon\hbar^2}{m} \right) \frac{1}{a} \int_0^a r \sin\left(\frac{\pi r}{a}\right) \cdot \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \sin\left(\frac{\pi r}{a}\right) \right) \right) dr = \dots$$



Если ввести ось вращения $\vec{n}$, то поворот можно описать с помощью вектора:

$$\delta \vec{r} = \vec{n} \delta \varphi, \text{ где } \delta \vec{r} = [\delta \vec{\varphi} \times \vec{r}]$$

$$\psi(\vec{r} + \delta \vec{r}) \approx \psi(\vec{r}) + \delta \vec{r} \cdot \nabla \psi(\vec{r}) = (1 + \delta \vec{r} \cdot \nabla) \psi(\vec{r}) = \{1 + ([\delta \vec{\varphi} \times \vec{r}] \cdot \nabla)\} \psi(\vec{r})$$

$$\text{или } \psi(\vec{r} + \delta \vec{r}) = \{1 + \delta \vec{\varphi} \cdot [\vec{r} \times \nabla]\} \psi(\vec{r})$$

$$\vec{L} = [\vec{r} \times \vec{p}] = -i\hbar [\vec{r} \times \nabla] \Rightarrow \hat{L}_{\delta \vec{\varphi}} = \frac{i}{\hbar} \delta \vec{\varphi} \cdot \vec{L} \text{ оператор малого поворота.}$$

$$\vec{L} = \hbar \vec{e} \rightarrow \vec{e} = [\vec{r} \times \vec{e}] = -i \begin{vmatrix} x_0 & y_0 & z_0 \\ x & y & z \\ \partial_x & \partial_y & \partial_z \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} x_0 & y_0 & z_0 \\ x & y & z \\ k_x & k_y & k_z \end{vmatrix}$$

Пространственный поворот:

$$\hat{H} \psi = E \psi, \quad \hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2I} \Rightarrow \frac{\hat{L}^2}{2I} \psi(\theta, \varphi) = E \psi(\theta, \varphi)$$

$$\hat{L}^2 \psi(\theta, \varphi) = \hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I} Y_{lm}(\theta, \varphi) = E Y_{lm}(\theta, \varphi) \Rightarrow E_l = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1)$$

m -квант не важен $\rightarrow 2l+1$ раз вырождены

$$\begin{aligned} \text{N2. } \hat{H} \psi &= E \psi \text{ где } \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \\ \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \psi &= E \psi \quad / \cdot \frac{1}{\hbar \omega} ; E = \frac{E}{\hbar \omega} ; \xi = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} ; p_\xi = i\hbar m \omega \end{aligned}$$

$$\frac{d}{dx} = \frac{d}{d\xi} \cdot \frac{d\xi}{dx} = \frac{p}{\hbar} \frac{d}{d\xi} \Rightarrow \left[\frac{p^2}{2} + \frac{\xi^2}{2} \right] \psi(\xi) = E \psi(\xi)$$

$$\text{Вводим операторы: } \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{a+a^\dagger}{\sqrt{2}} ; \hat{p} = \frac{a-a^\dagger}{i\sqrt{2}}$$

$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ ~ оператор уничтожения

$$aa^\dagger - a^\dagger a = 1$$

$a^\dagger|n-1\rangle = \sqrt{n}|n\rangle$ ~ оператор рождения

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \left[\frac{(a-a^\dagger)(a-a^\dagger) + (a+a^\dagger)(a+a^\dagger)}{2} \right] = \frac{aa^\dagger + a^\dagger a}{2} = \frac{2aa^\dagger + 1}{2}$$

$$\Rightarrow (a^\dagger a + \frac{1}{2}) \psi = E \psi \rightarrow a^\dagger a \psi = \alpha \psi, \quad \alpha = E - \frac{1}{2}$$

$$\begin{cases} a+a^\dagger = \sqrt{2}x \\ a-a^\dagger = i\sqrt{2}p \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} a = \frac{x+ip}{\sqrt{2}} \\ a^\dagger = \frac{x-ip}{\sqrt{2}} \end{cases}$$

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

В основном состоянии: $a|0\rangle = 0$ ~ решение простого уравнения не может.

$$\left(\frac{\hat{x}+i\hat{p}}{\sqrt{2}} \right) \psi_0(\xi) = 0 \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \psi_0(\xi) = 0$$

$$\xi \psi + \frac{\partial \psi}{\partial \xi} = 0 \rightarrow \xi d\xi = -\frac{d\psi}{\psi} \rightarrow \psi_0 = C_1 e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

$$\text{Нормировка: } \int_{-\infty}^{\infty} C_1^2 e^{-\xi^2} d\xi = C_1^2 \sqrt{\pi} = 1 \Rightarrow \psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}$$

Первое возбужденное:

$$a^+ |0\rangle = |1\rangle \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{\xi^2}{2}} = \psi_1(\xi)$$

$$\Rightarrow \psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{n! 2^n}} \left\{ \xi - \frac{\partial}{\partial \xi} \right\}^n e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

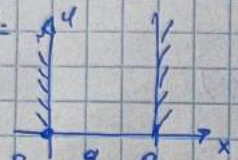
н/о операторов энергии: a и a^+

$$a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \quad |0 \leq n-1| \Rightarrow \langle n-1 | a | n \rangle = \sqrt{n}$$

$$a^+ |n-1\rangle = \sqrt{n} |n\rangle \quad |0 \leq n| \Rightarrow \langle n | a^+ | n-1 \rangle = \sqrt{n}$$

$$\hat{a} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad \hat{a}^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad n' = n-1$$

н/б.



$\psi = A x(x-a)$

Нормировка: $A^2 \int_0^a x^2 (x-a)^2 dx = A^2 \int_0^a x^2 (x^2 - 2ax + a^2) dx =$

$$= A^2 \int_0^a (x^4 - 2ax^3 + a^2x^2) dx = A^2 \left(\frac{x^5}{5} - \frac{2ax^4}{4} + \frac{a^2x^3}{3} \right) \Big|_0^a = A^2 \left(\frac{a^5}{5} - \frac{a^5}{2} + \frac{a^5}{3} \right) =$$

$$= A^2 \cdot a^5 \cdot \frac{1}{30} = 1 \Rightarrow A^2 = \frac{30}{a^5}$$

$\langle 4 \rangle = 0 \sim$ все

$$\langle 5 \rangle = + \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^a A^2 \left| \frac{d\psi}{dx} \right|^2 dx = \frac{\hbar^2}{2m} A^2 \int_0^a (2x-a)^2 dx = \frac{\hbar^2}{2m} A^2 \int_0^a (4x^2 - 4ax + a^2) dx =$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m} A^2 \left(\frac{4}{3} a^3 - \frac{2a^3}{1} + a^3 \right) = \frac{\hbar^2}{2m} A^2 \frac{a^3}{3} = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{30}{a^5} \cdot \frac{a^3}{3} = \frac{5\hbar^2}{ma^2}$$

То же самое:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = 0 \Rightarrow \psi = C_1 \cos kx + C_2 \sin kx$$

$\psi(0) = \psi(a) = 0$; $\psi(0) = C_1 = 0 \Rightarrow \sin ka = 0 \Rightarrow ka = \pi n$

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{a^2} \Rightarrow E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{4ma^2} \sim 4,9 \frac{\hbar^2}{ma^2}$$

11. Сферические гармоника:

$$\hat{L}_z^2 Y_{\ell, m}(\theta, \varphi) = m Y_{\ell, m}(\theta, \varphi) ; \hat{L}^2 Y_{\ell, m}(\theta, \varphi) = \ell(\ell+1) Y_{\ell, m}(\theta, \varphi)$$

Нормировка: $\int |Y_{\ell, m}|^2 \sin\theta d\theta d\varphi = 1$ — норм. волновой функции электрона в телесном угле

$$Y_{\ell, m} = \Theta_{\ell, m}(\theta) \cdot \Phi_m(\varphi)$$

$$-i \frac{\partial}{\partial \varphi} \Theta_{\ell, m}(\theta) \Phi_m(\varphi) = m \Theta_{\ell, m}(\theta) \Phi_m(\varphi)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \Phi_m}{\partial \varphi} = i m \Phi_m(\varphi) \rightarrow \Phi_m(\varphi) = C \cdot e^{i m \varphi}$$

$$\int_0^{2\pi} |\Phi_m(\varphi)|^2 d\varphi = C^2 \int_0^{2\pi} d\varphi = C^2 2\pi = 1 \Rightarrow \Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i m \varphi}$$

Вводим поворачивающие и пожимые операторы: $\hat{L}_{\pm} = \hat{L}_x \pm i \hat{L}_y$

$$\Rightarrow \hat{L}_{\pm} = e^{\pm i \varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \text{ функции } m = -\ell, \dots, \ell$$

$$L_{+} Y_{\ell, \ell} = 0 \Rightarrow e^{i \varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) Y_{\ell, \ell}(\theta, \varphi) = 0$$

$$e^{i \varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \cdot \Theta_{\ell, \ell}(\theta) \cdot e^{i \ell \varphi} = 0$$

$$e^{i \varphi} \cdot e^{i \ell \varphi} \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} + i e^{i \varphi} \cot \theta \cdot \Theta(\theta) \cdot i \ell e^{i \ell \varphi} = 0$$

$$\frac{\partial \Theta}{\partial \theta} - \ell \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \Theta = 0 \Rightarrow \frac{d\Theta}{\Theta} = \ell \frac{\cos \theta}{\sin \theta} d\theta \Rightarrow \Theta_{\ell, \ell}(\theta) = C \sin^{\ell} \theta$$

$$\Rightarrow Y_{\ell, \ell} = C \sin^{\ell} \theta e^{i \ell \varphi}$$

$$\ell=0: Y_{0,0} = C \Rightarrow C^2 \cdot 4\pi = 1 \rightarrow C = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \Rightarrow Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$\ell=1: Y_{1,1} = C \sin \theta e^{i \varphi}$$

$$\Rightarrow \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} C^2 \sin^2 \theta \cdot \sin \theta d\theta d\varphi = 2\pi C^2 \int_0^{\pi} (1 - \cos^2 \theta) (d \cos \theta) = -2\pi C^2 \left(\cos \theta - \frac{\cos^3 \theta}{3} \right) \Big|_0^{\pi}$$

$$= 2\pi C^2 \left(\frac{\cos^3 \theta}{3} - \cos \theta \right) \Big|_0^{\pi} = 2\pi C^2 \left[\frac{1}{3} + 1 - \frac{1}{3} + 1 \right] = \frac{8}{3} \pi C^2 = 1$$

$$\Rightarrow C = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \Rightarrow Y_{1,1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i \varphi}$$

$$\ell=1: Y_{\ell, m}(\theta, \varphi) = \sqrt{(\ell+m)(\ell-m+1)} Y_{\ell, m-1}(\theta, \varphi) \rightarrow Y_{1,0}, Y_{1,-1} ?$$

12. Атом водорода — представление в сферических координатах.

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \quad (в СИ)$$

$$\hat{H}\psi = E\psi ; \psi(\vec{r}) = R(r) Y_{\ell, m}(\theta, \varphi) \text{ — сферические гармоника}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\ell^2}{r^2} - \frac{e^2}{r} \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \psi = E\psi ; R(r) = \frac{u(r)}{r}$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} \right] u = -|E| u$$

$$\text{Обозначим: } \kappa = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} ; \rho = \kappa r$$

$$\frac{d}{dr} = \frac{d}{d\rho} \cdot \frac{d\rho}{dr} = \kappa \frac{d}{d\rho} ; \frac{d^2}{dr^2} = \frac{2m|E|}{\hbar^2} \frac{d^2}{d\rho^2}$$

$$\begin{aligned}
 & -\frac{\hbar^2}{2m|E|} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[-\frac{e^2 2m \hbar^2}{4\pi \epsilon_0 \hbar^2 |E|} \cdot \frac{1}{4\pi \epsilon_0 r} + \frac{\hbar^2}{2m|E|} \cdot \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] u = -u \\
 & -\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{1}{\hbar^2} \left[-\frac{\tilde{e}^2 2m}{4\pi \epsilon_0 \hbar^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] u = -u \\
 & -\frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{1}{r^2} \left[-\frac{2m \tilde{e}^2 r}{4\pi \epsilon_0 \hbar^2} + \frac{\ell(\ell+1) \hbar^2}{r^2} \right] u = -u \\
 & -\frac{d^2 u}{dr^2} + \left[-\frac{2m \tilde{e}^2 r}{4\pi \epsilon_0 \hbar^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] u = -u \\
 & \text{Введём } \rho = \frac{m \tilde{e}^2}{2\pi \epsilon_0 \hbar^2} r
 \end{aligned}$$

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} = \left[1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right] u$$

Асимптотическое поведение $u(\rho)$: $\rho \rightarrow \infty \Rightarrow \frac{d^2 u}{d\rho^2} = u \Rightarrow u = A e^{\rho} + B e^{-\rho}$

$\rho \rightarrow 0$: $\frac{d^2 u}{d\rho^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} u = 0 \quad u = C \rho^\lambda$

$\Rightarrow \lambda(\lambda-1) C \rho^{\lambda-2} - \ell(\ell+1) C \rho^{\lambda-2} = 0 \Rightarrow \lambda(\lambda-1) = \ell(\ell+1)$

$\lambda_1 = \ell+1$; $\lambda_2 = -\ell$ — 0 — фактически.

$\Rightarrow u = v(\rho) e^{-\rho} \rho^{\ell+1}$

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} = v' e^{-\rho} \rho^{\ell+1} - v e^{-\rho} \rho^{\ell+1} + (\ell+1) v' e^{-\rho} \rho^{\ell} = e^{-\rho} (v' \rho^{\ell+1} - v \rho^{\ell+1} + (\ell+1) v' \rho^{\ell})$$

$$\begin{aligned}
 \frac{d^2 u}{d\rho^2} &= -e^{-\rho} (v' \rho^{\ell+1} - v \rho^{\ell+1} + (\ell+1) v' \rho^{\ell}) + e^{-\rho} (v'' \rho^{\ell+1} + (\ell+1) v' \rho^{\ell} - v' \rho^{\ell+1} - (\ell+1) v' \rho^{\ell} + \\
 &+ (\ell+1) v' \rho^{\ell} + (\ell+1) \ell v' \rho^{\ell-1}) = \\
 &= e^{-\rho} (-v' \rho^{\ell+1} + v \rho^{\ell+1} - (\ell+1) v' \rho^{\ell} + v'' \rho^{\ell+1} + (\ell+1) v' \rho^{\ell} - v' \rho^{\ell+1} - (\ell+1) v' \rho^{\ell} + \\
 &+ (\ell+1) v' \rho^{\ell} + (\ell+1) \ell v' \rho^{\ell-1})
 \end{aligned}$$

$\Rightarrow \rho v'' + v' [-2\rho + 2\ell + 2] + v [-2\ell - 2] + \rho_0 v = 0$

$v(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j \rho^j$

$\rho \cdot \sum_{j=0}^{\infty} j(j-1) c_j \rho^{j-2} + [-2\rho + 2\ell + 2] \sum_{j=0}^{\infty} j c_j \rho^{j-1} + [\rho_0 - 2\ell - 2] \sum_{j=0}^{\infty} c_j \rho^j = 0$

$\rho \cdot \sum_{j=0}^{\infty} j(j+1) c_{j+1} \rho^{j-1} + [-2\rho + 2\ell + 2] \sum_{j=0}^{\infty} (j+1) c_{j+1} \rho^j + [\rho_0 - 2\ell - 2] \sum_{j=0}^{\infty} c_j \rho^j = 0$

$\rightarrow$ выбер. номер степени j : $j-1$

$j(j+1) c_{j+1} + 2 c_{j+1} (j+1) (\ell+1) - 2 c_j j + c_j (-2\ell - 2 + \rho_0) = 0$

$\Rightarrow c_{j+1} [j(j+1) + 2(\ell+1)(j+1)] + c_j (-2j - 2\ell - 2 + \rho_0) = 0$

$\rightarrow$ Рекуррентное соотношение: $c_{j+1} = -\frac{c_j (-2j - 2\ell - 2 + \rho_0)}{(j+1)(j+2(\ell+1))}$

$\Rightarrow 2j + 2\ell + 2 = \rho_0 \equiv 2n$ — г.д. г.д.

$\rho_0 = \frac{\tilde{e}^2 m}{2\pi \epsilon_0 \hbar^2}$; $\hbar = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} \Rightarrow E_n = -\left[\frac{\tilde{e}^2}{4\pi \epsilon_0} \right]^2 \cdot \frac{1}{n^2} = -\frac{E_1}{n^2}$

или $n = n_r + \ell + 1$.

$\hookrightarrow$ г.д. (раз. к.в. число) — величина степени дискретности.

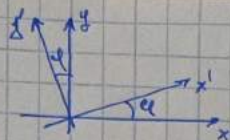
$\ell = 0, \dots, n-1$, $m = -\ell, \dots, \ell$ $\Rightarrow$ в.в. $\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell+1) = \frac{2n-1}{2} \cdot n = n^2$

№3. $U(x, y) = \frac{\kappa}{2}(x^2 + y^2) + \alpha xy$ ($|\alpha| < \kappa$) $\rightarrow$ осцилляторы.

$$x = x' \cos \varphi - y' \sin \varphi$$

$$y = x' \sin \varphi + y' \cos \varphi$$

$\rightarrow$ повернуть на $\frac{\pi}{4}$



$$x' = \frac{x - y}{\sqrt{2}}, \quad y' = \frac{x + y}{\sqrt{2}}$$

$$\Rightarrow U(x', y') = \frac{\kappa}{2} \left(\frac{x'^2}{2} - \frac{x'y'}{2} + \frac{y'^2}{2} + \frac{x'^2}{2} + \frac{x'y'}{2} + \frac{y'^2}{2} \right) + \alpha \frac{(x' - y')(x' + y')}{2} =$$

$$= \frac{\kappa}{2} (x'^2 + y'^2) + \frac{\alpha}{2} (x'^2 - y'^2) = \frac{\kappa + \alpha}{2} x'^2 + \frac{\kappa - \alpha}{2} y'^2 = \frac{\kappa_1}{2} x'^2 + \frac{\kappa_2}{2} y'^2$$

$$\Rightarrow H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2}{\partial y'^2} \right) + \frac{\kappa_1}{2} x'^2 + \frac{\kappa_2}{2} y'^2$$

$\rightarrow$ независимые осцилляторы

$$\frac{\kappa_1 x'^2}{2} = \frac{m_1 \omega_1^2 x'^2}{2} \Rightarrow \omega_{1,2} = \sqrt{\frac{\kappa_{1,2}}{m_{1,2}}}$$

$$\Rightarrow E = \hbar \omega_1 \left(n_{x'} + \frac{1}{2} \right) + \hbar \omega_2 \left(n_{y'} + \frac{1}{2} \right) = \hbar \left[\sqrt{\frac{\kappa + \alpha}{m}} \left(n_{x'} + \frac{1}{2} \right) + \sqrt{\frac{\kappa - \alpha}{m}} \left(n_{y'} + \frac{1}{2} \right) \right]$$

$$\hat{L}_z Y_{l,m}(\theta, \varphi) = m Y_{l,m}(\theta, \varphi) ; \hat{L}^2 Y_{l,m}(\theta, \varphi) = l(l+1) Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

нормировка: $\int |Y_{l,m}|^2 \sin \theta d\theta d\varphi = 1$ — ампл. вероятности нахождения электрона в элементарном объеме dV

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \Theta_{l,m}(\theta) \Phi_m(\varphi)$$

$$-i \frac{\partial}{\partial \varphi} \Theta_{l,m}(\theta) \Phi_m(\varphi) = m \Theta_{l,m}(\theta) \Phi_m(\varphi)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \Phi_m}{\partial \varphi} = i m \Phi_m(\varphi) \rightarrow \Phi_m(\varphi) = C \cdot e^{i m \varphi}$$

$$\int_0^{2\pi} |\Phi_m(\varphi)|^2 d\varphi = C^2 \int_0^{2\pi} 1 d\varphi = C^2 2\pi = 1 \Rightarrow \Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i m \varphi}$$

Вводим понижающие и повышающие операторы: $\hat{L}_{\pm} = \hat{L}_x \pm i \hat{L}_y$

$$\Rightarrow \hat{L}_{\pm} = e^{\pm i \varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \text{ применим } m = -l, \dots, l$$

$$\hat{L}_+ Y_{l,l} = 0 \Rightarrow e^{i \varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) Y_{l,l}(\theta, \varphi) = 0$$

$$e^{i \varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \Theta_{l,l}(\theta) \cdot e^{i l \varphi} = 0$$

$$e^{i \varphi} e^{i l \varphi} \frac{\partial}{\partial \theta} + i e^{i \varphi} \cot \theta \cdot \Theta_{l,l}(\theta) \cdot i l e^{i l \varphi} = 0$$

$$\frac{\partial \Theta}{\partial \theta} - l \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \cdot \Theta = 0 \Rightarrow \frac{d\Theta}{\Theta} = l \frac{\cos \theta}{\sin \theta} d\theta \Rightarrow \Theta_{l,l}(\theta) = C \sin^l \theta$$

$$\Rightarrow Y_{l,l} = C \sin^l \theta e^{i l \varphi}$$

$$L_- Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \sqrt{l(l+1)(l-m)(l-m+1)} Y_{l,m-1}(\theta, \varphi)$$

$$L_- Y_{l,0} = 0 \Rightarrow C^2 4\pi = 1 \rightarrow C = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \Rightarrow Y_{l,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

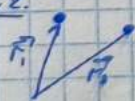
$$L_- Y_{l,1} = C \sin \theta e^{i \varphi}$$

$$\Rightarrow \int_0^{2\pi} \int_0^\pi e^{2i \varphi} \sin^2 \theta \sin \theta d\theta d\varphi = 2\pi C^2 (1-1) \int_0^\pi (1 - \cos^2 \theta) d(\cos \theta) = -2\pi C^2 (\cos \theta - \frac{\cos^3 \theta}{3}) =$$

$$= 2\pi C^2 \left(\frac{\cos^3 \theta}{3} - \cos \theta \right) \Big|_0^\pi = 2\pi C^2 \left[-\frac{1}{3} + 1 - \frac{1}{3} + 1 \right] = \frac{8}{3} \pi C^2 = 1$$

$$\Rightarrow Y_{l,1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i \varphi}$$

н.2.



В кулоновом поле можно разделить движение элект. катод. + по движению центра массе и вращение массового центра центра

$$\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2} ; \mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2) ; \frac{1}{m} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$$

$$\Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + U(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}, \vec{r}') = E \psi(\vec{r}, \vec{r}')$$

$$\text{используем разделение: } \psi(\vec{r}, \vec{r}') = e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} \psi(\vec{r}')$$

$$\Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + U(\vec{r}') \right] \psi(\vec{r}') = E_{\text{new}} \psi(\vec{r}'), \quad E_{\text{new}} = E - \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} \right) \right] R(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \right) R(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

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

Хотим абстрагироваться:

$$\alpha = \frac{\hbar^2}{m^2 \tilde{e}^2} \sim \text{кулон. сф. димен.}$$

$\tilde{e}$ - сф. заряд.

$$\frac{m}{\hbar^2} \cdot \tilde{e} \cdot \alpha^2 = 1 = \frac{m \hbar^4 \tilde{e}}{\hbar^2 m^2 \tilde{e}^4} = 1 \Rightarrow \tilde{e} = \frac{m \tilde{e}^4}{\hbar^2}$$

По этой задаче об $\tilde{e}$ в атомном вырождении, сами функции:

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} + 2\left(\epsilon + \frac{1}{2}\right) \right] R(r) = 0 \Rightarrow R = e^{-\frac{r}{2}} \rho^l L(\rho)$$

$$\epsilon = -\frac{1}{2n^2}, \quad n = n_r + l + 1.$$

м. к в. число $l = 0, \dots, n-1$; $m = -l, \dots, l$

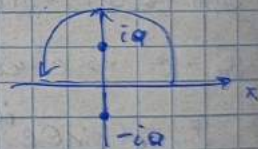
$$\Rightarrow \text{с. вып.} \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$$

нз. $U(x) = \frac{\kappa x^2}{2}$; $\psi(x) = \frac{e}{1 + \frac{x^2}{a^2}}$

Нормировка:

$$e^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(1 + \frac{x^2}{a^2})^2} dx = \left\{ \text{вычисляем} \right\} = 1. \Rightarrow e^2 = \frac{2}{\pi a}$$

$$\begin{aligned} \langle u \rangle &= e^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(1 + \frac{x^2}{a^2})} \cdot \frac{\kappa x^2}{2} \cdot \frac{1}{(1 + \frac{x^2}{a^2})} dx = \frac{a^2 \kappa e^2}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x^2 dx}{(1 + \frac{x^2}{a^2})^2} = \left\{ u = x \rightarrow du = dx \right\} = \\ &= \frac{a^2 \kappa e^2}{4} \left[-\frac{x}{1 + \frac{x^2}{a^2}} \right]_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{a dx \cdot \frac{x}{a}}{1 + \frac{x^2}{a^2}} = \frac{a^2 \kappa e^2}{4} \cdot a \cdot \arctg\left(\frac{x}{a}\right) \Big|_{-\infty}^{+\infty} = \\ &= \frac{a^2 \kappa e^2}{4} \cdot a \cdot \pi = \frac{\kappa a^3 \pi}{4} \cdot \frac{2}{\pi a} = \frac{\kappa a^2}{2} \end{aligned}$$



$$I_1 = a^4 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{(a^2 + x^2)^2} = a^4 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dz}{(z - ia)^2 (z + ia)^2}$$

$$\text{res } f(z) = \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{(z + ia)^2} \right) \Big|_{z=ia} = -\frac{2}{(2ia)^3} = \frac{1}{4ia^3}$$

$$\Rightarrow I_1 = \frac{2\pi i \cdot a^4}{4ia^3} = \frac{\pi a}{2}$$

$$\langle v \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{d\psi}{dx} \right|^2 dx = \frac{\hbar^2}{2m} e^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{4x^2 dx}{a^4 (1 + \frac{x^2}{a^2})^4} = \frac{e \hbar^2 a^4}{m} e^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x^2 dx}{(x^2 + a^2)^4}$$

$$I_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{2^2 dz}{(z + ia)^4 (z - ia)^4} = 2\pi i \text{res } f(z) = 2\pi i \frac{1}{3!} \frac{d^3}{dz^3} \left(\frac{2^2}{(z + ia)^4} \right) \Big|_{z=ia} =$$

$$= 2\pi i$$

нз. Сферические гармоники:

28

$$\hat{L}_z Y_{\ell, m}(\theta, \varphi) = m Y_{\ell, m}(\theta, \varphi) ; \hat{L}^2 Y_{\ell, m}(\theta, \varphi) = \ell(\ell+1) Y_{\ell, m}(\theta, \varphi)$$

Нормировка: $\int |Y_{\ell, m}|^2 \sin \theta d\varphi d\theta = 1$. *нормировка сферических гармоник в экваториальной плоскости*

$$Y_{\ell, m}(\theta, \varphi) = \Theta_{\ell, m}(\theta) \Phi_m(\varphi)$$

$$-i \frac{\partial}{\partial \varphi} \Theta_{\ell, m}(\theta) \Phi_m(\varphi) = m \Theta_{\ell, m}(\theta) \Phi_m(\varphi)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \Phi_m}{\partial \varphi} = i m \Phi_m(\varphi) \rightarrow \Phi_m(\varphi) = C \cdot e^{i m \varphi}$$

$$\int_0^{2\pi} |\Phi_m(\varphi)|^2 d\varphi = C^2 \int_0^{2\pi} 1 d\varphi = C^2 2\pi = 1 \Rightarrow \Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i m \varphi}$$

Вторые производные и комплексные операторы: $\hat{L}_z = \hat{L}_x \pm i \hat{L}_y$

$$\Rightarrow \hat{L}_z = e^{i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \text{ функции } m = -\ell, \dots, \ell$$

$$\hat{L}_z Y_{\ell, \ell} = 0 \Rightarrow e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) Y_{\ell, \ell}(\theta, \varphi) = 0$$

$$e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \Theta_{\ell, \ell}(\theta) e^{i\ell\varphi} = 0$$

$$e^{i\varphi} e^{i\ell\varphi} \frac{\partial \Theta_{\ell, \ell}}{\partial \theta} + i e^{i\varphi} \cot \theta \cdot \Theta_{\ell, \ell}(\theta) \cdot i \ell e^{i\ell\varphi} = 0$$

$$\frac{\partial \Theta_{\ell, \ell}}{\partial \theta} - \ell \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \cdot \Theta_{\ell, \ell} = 0 \Rightarrow \frac{d\Theta_{\ell, \ell}}{\Theta_{\ell, \ell}} = \ell \frac{\cos \theta}{\sin \theta} d\theta \Rightarrow \Theta_{\ell, \ell}(\theta) = C \sin^\ell \theta$$

$$\Rightarrow Y_{\ell, \ell} = C \sin^\ell \theta e^{i\ell\varphi}$$

$$\hat{L}_- Y_{\ell, m}(\theta, \varphi) = \sqrt{\ell(\ell+m)(\ell-m+1)} Y_{\ell, m-1}(\theta, \varphi)$$

$$\ell=0: Y_{0,0} = C \Rightarrow C^2 \cdot 4\pi = 1 \rightarrow C = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \Rightarrow Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$\ell=1: Y_{1,1} = C \sin \theta e^{i\varphi}$$

$$\Rightarrow \int \int C^2 \sin^2 \theta \sin \theta d\varphi d\theta = 2\pi C^2 \int_0^\pi (1 - \cos^2 \theta) \sin \theta d\theta = 2\pi C^2 \left(\frac{\cos^3 \theta}{3} - \cos \theta \right) \Big|_0^\pi = 2\pi C^2 \left[-\frac{1}{3} + 1 - \frac{1}{3} + 1 \right] = \frac{8}{3} \pi C^2 = 1 \Rightarrow Y_{1,1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi}$$

нз. $U(x) = \frac{\lambda x^2}{2}$; $\psi_u(x) = \frac{C}{1 + \frac{\lambda x^2}{a^2}}$

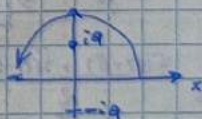
Нормировка:

$$C^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{\left(1 + \frac{\lambda x^2}{a^2}\right)^2} = C^2 a^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{(a^2 + \lambda x^2)^2} = a^4 C^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dz}{(z - i a)^2 (z + i a)^2}$$

$$= a^4 C^2 2\pi i \operatorname{res}_{z=i a} f(z) = a^4 C^2 \cdot 2\pi i \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{(z+i a)^2} \right) \Big|_{z=i a} = a^4 C^2 2\pi i \cdot \frac{1}{4i a^3} = 1$$

$$\frac{\pi a C^2}{2} = 1 \Rightarrow C^2 = \frac{2}{\pi a}$$

$$\langle u \rangle = C^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\left(1 + \frac{\lambda x^2}{a^2}\right)^2} \cdot \frac{\lambda x^2}{2} \cdot \frac{1}{\left(1 + \frac{\lambda x^2}{a^2}\right)^2} dx = \frac{a^4 \lambda C^2}{4} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x^2 dx}{\left(1 + \frac{\lambda x^2}{a^2}\right)^4} = \left\{ u=x \rightarrow du=\lambda x dx \right. \\ \left. \begin{aligned} &= \frac{a^4 \lambda C^2}{4} \left[-\frac{x}{1 + \frac{\lambda x^2}{a^2}} \right]_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\alpha \sqrt{\frac{x}{1 + \frac{\lambda x^2}{a^2}}}}{1 + \frac{\lambda x^2}{a^2}} dx \right] = \frac{a^4 \lambda C^2}{4} \cdot a \cdot \arctan \left(\frac{\lambda}{a} \right) \Big|_{-\infty}^{+\infty} = \frac{a^4 \lambda C^2}{4} \cdot \pi = \\ &= \frac{\lambda a^3}{4} \cdot \frac{2}{\pi a} = \frac{\lambda a^2}{2} \end{aligned} \right.$$



$$\langle \sigma \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\psi} \frac{d\psi}{dx} e^{ikx} = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{4x^2 dx}{4^x (1 + \frac{x^2}{a^2})^4} = \frac{2\hbar^2 a^2}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x^2 dx}{(x^2 + a^2)^4}$$

$$I_2 = \int_0^{\infty} \frac{z^2 dz}{(z+ia)^4 (z-ia)^4} = 2\pi i \operatorname{Res}_{z=ia} f(z) = 2\pi i \frac{1}{6} \frac{d^3}{dz^3} \left(\frac{z^2}{(z+ia)^4} \right) \Big|_{z=ia}$$

№2. Бесконечно малое вращение: $\hat{R} = [1 + i(\delta\vec{\varphi} \cdot \vec{S})]$

$\delta\vec{\varphi} = \vec{n} \delta\varphi \rightarrow$ вращаем ось z , чтобы она смотрела вдоль $\vec{n}$.

$$\Rightarrow \hat{R} = [1 + i\delta\varphi \hat{S}_z], \text{ где } \hat{S}_z = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

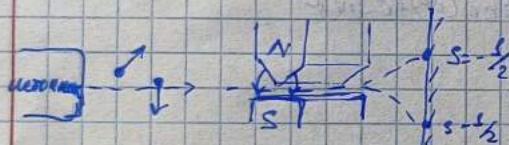
$$\hat{R}\psi = \psi + i \frac{\delta\varphi}{2} \hat{S}_z \psi = \psi' \Rightarrow \frac{\psi' - \psi}{\delta\varphi} = \frac{i\hat{S}_z \psi}{2} \Rightarrow \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = \frac{i\hat{S}_z \psi}{2}$$

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \Rightarrow \frac{\partial \psi_1}{\partial \varphi} = \frac{i}{2} \psi_1, \quad \frac{\partial \psi_2}{\partial \varphi} = -\frac{i}{2} \psi_2$$

$$\Rightarrow \psi_1 = \psi_1^0 e^{i\frac{\varphi}{2}}, \quad \psi_2 = \psi_2^0 e^{-i\frac{\varphi}{2}} \Rightarrow \psi = e^{i\frac{\varphi}{2} \hat{S}_z} \psi^0$$

Для произвольной оси

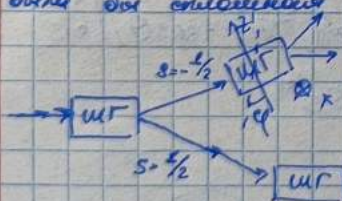
$$\psi = e^{i\varphi(\vec{n}, \vec{S})} \psi^{(0)} \Rightarrow \hat{R} = e^{i\frac{\varphi}{2}(\vec{n}, \vec{\sigma})}$$



Полная заряженная частица в магн. поле представляет из себя магнитный диполь $\rightarrow$ как вращающийся ток

$$\vec{\mu} = \frac{e\hbar}{2mc} g \vec{S} \Rightarrow \vec{F} = (\vec{\mu} \cdot \nabla) \vec{B}$$

Если в магнетике нет поворота, то магнит неферритовый, то на выходе была бы статическая линия. А в в. мех. спин дискретный $\rightarrow$ 2 линии.



Если повернем у него будет новая ось z !

$$f(a + b\vec{v}) = A + B\vec{v}$$

$$A = \frac{f(a+b) + f(a-b)}{2} = \frac{e^{i\frac{\varphi}{2}} + e^{-i\frac{\varphi}{2}}}{2} = \cos \frac{\varphi}{2}, \quad \vec{B} = \vec{n}, \quad \frac{f(a+b) - f(a-b)}{2} = \frac{e^{i\frac{\varphi}{2}} - e^{-i\frac{\varphi}{2}}}{2} = i \sin \frac{\varphi}{2}$$

$$\Rightarrow \hat{R}_\varphi = \cos \frac{\varphi}{2} + i(\vec{n} \cdot \vec{\sigma}) \sin \frac{\varphi}{2} \text{ для } S = \frac{1}{2}$$

Прибор повернул ось $x \Rightarrow \vec{v}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

$$\Rightarrow \hat{R} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\varphi}{2} & i \sin \frac{\varphi}{2} \\ i \sin \frac{\varphi}{2} & \cos \frac{\varphi}{2} \end{pmatrix}$$

Если маг. поле: $\psi_v = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

$$\hat{R} \psi_v = \begin{pmatrix} \cos \frac{\varphi}{2} & i \sin \frac{\varphi}{2} \\ i \sin \frac{\varphi}{2} & \cos \frac{\varphi}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i \sin \frac{\varphi}{2} \\ \cos \frac{\varphi}{2} \end{pmatrix}$$

$$\text{Интерференция: } I_2 = \cos^2 \frac{\varphi}{2}, \quad I_1 = \sin^2 \frac{\varphi}{2} \rightarrow I = I_1 + I_2 = 1.$$

н.д. $\hat{H}\psi = E\psi$ $\psi(\vec{r}) \leftarrow$ зависит от всех динам. перемен.

Вариационная функция $\rightarrow$ ур-е движения опр-ся минимизацией коэф-та функции (или функционала).

В кв. механике $F = \int \psi^* (\hat{H} - E) \psi dx$ $\rightarrow$ вариация

$$\delta F = \int \delta \psi^* (\hat{H} - E) \psi dx + \int \psi^* (\hat{H} - E) \delta \psi dx \Rightarrow \frac{\delta F}{\delta \psi^*} = (\hat{H} - E) \psi = 0$$

$\rightarrow$ вариацион. производная.

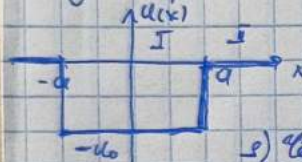
$$\Rightarrow \hat{H}\psi = E\psi$$

Прямой вариацион. принцип внешнего функционала выбирает пробную ф-ию $\rightarrow$ минимум по ГЗ.

$$\psi_{\text{var}}(x; \alpha_j) \Rightarrow E \approx \langle H \rangle_{\min} \rightarrow \langle U_{\text{вн}} \rangle; \langle T_{\text{к}} \rangle \Rightarrow \alpha_{\min}.$$

Осцилляционная теорема: для одномерного движения в.р. ψ дин. системы с $(n+1)$ значением энергии (собств. значения) обращаются в нуль n раз.

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



Яма симметрич. $\rightarrow x \rightarrow -x$ тоже допуст. решением м.б. как четное так и нечетное решение.

1) Четные $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} = E \psi_x = -|E| \psi \Rightarrow \frac{d^2 \psi}{dx^2} + k^2 \psi = 0$

$$\Rightarrow \psi(x) = C e^{-\alpha x}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} = -U_0 \psi = -|E| \psi \quad \left| -\frac{2m}{\hbar^2} \Rightarrow \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{(U_0 - |E|) 2m}{\hbar^2} \psi = 0 \Rightarrow \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \kappa^2 \psi = 0 \right.$$

$$\psi_{\pm} = C_1 \sin \kappa x + C_2 \cos \kappa x \quad \rightarrow \text{в четной серии.}$$

$$\text{ГЗ: } \begin{cases} \psi_{\pm}(a) = \psi_{\pm}(a) \\ \psi'_{\pm}(a) = -\psi'_{\pm}(a) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} C_1 \cos \kappa a = C e^{-\kappa a} \\ -\kappa C_1 \sin \kappa a = -\kappa C e^{-\kappa a} \end{cases} \Rightarrow \kappa \tan(\kappa a) = \kappa$$

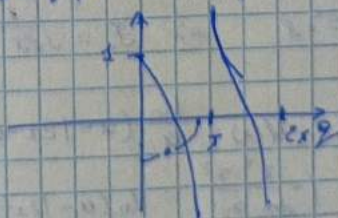
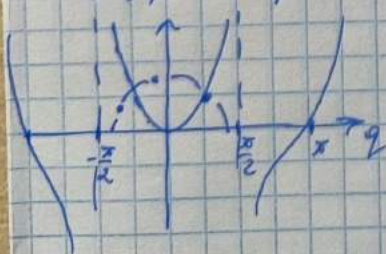
2) Для нечетной серии:

$$\psi_{\pm}(x) = C_1 \sin \kappa x \rightarrow \text{ГЗ: } \begin{cases} C_1 \sin \kappa a = C e^{-\kappa a} \\ \kappa C_1 \cos \kappa a = -\kappa C e^{-\kappa a} \end{cases} \Rightarrow \kappa \cot \kappa a = -\kappa$$

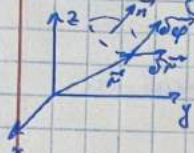
$$\kappa a \cot \kappa a = -\kappa a \rightarrow \omega^2 - q^2 = \frac{\kappa m U_0 a^2}{\hbar^2} - \kappa^2 a^2 = \frac{2m U_0 a^2}{\hbar^2} - \frac{2m U_0 a^2 + 2m |E| a^2}{\hbar^2} = \frac{2m |E| a^2}{\hbar^2} - \kappa^2 a^2$$

$$\Rightarrow q \cot q = \sqrt{\omega^2 - q^2}$$

$$q \cot q = -\sqrt{\omega^2 - q^2}$$



12. Как выглядит орбитальный момент:



$$\delta \vec{r} = \vec{r} \delta \varphi ; \delta \vec{r} = [\delta \vec{r} \times \vec{r}]$$

$$\psi(\vec{r} + \delta \vec{r}) = \psi(\vec{r}) + \delta \vec{r} \cdot \nabla \psi(\vec{r}) = (1 + \delta \vec{r} \cdot \nabla) \psi(\vec{r}) = 1 + ([\delta \vec{r} \times \vec{r}] \cdot \nabla) \psi(\vec{r})$$

$$\hat{L}_z = i \hbar (\delta \vec{r} \cdot \nabla) \quad \hat{L} \sim \text{оператор орбит. момента.}$$

Сферические гармоники:

$$\hat{L}_z Y_{\ell, m}(\theta, \varphi) = m Y_{\ell, m}(\theta, \varphi) ; \hat{L}^2 Y_{\ell, m}(\theta, \varphi) = \ell(\ell+1) Y_{\ell, m}(\theta, \varphi)$$

Нормировка: $\int |Y_{\ell, m}|^2 \sin \theta d\theta d\varphi = 1$ - интегр. вероятности нахождения частицы в элементарном телесном угле.

$$Y_{\ell, m}(\theta, \varphi) = \Theta_{\ell, m}(\theta) \Phi_m(\varphi)$$

$$-i \hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \Theta_{\ell, m}(\theta) \Phi_m(\varphi) = m \Theta_{\ell, m}(\theta) \Phi_m(\varphi)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \Phi_m}{\partial \varphi} = i m \Phi_m(\varphi) \rightarrow \Phi_m(\varphi) = C e^{i m \varphi}$$

$$\int_0^{2\pi} |\Phi_m(\varphi)|^2 d\varphi = C^2 \int_0^{2\pi} 1 d\varphi = C^2 \cdot 2\pi = 1 \Rightarrow \Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i m \varphi}$$

Введены повышающие и понижающие операторы: $\hat{L}_{\pm} = \hat{L}_x \pm i \hat{L}_y$

$$\Rightarrow \hat{L}_{\pm} = e^{\pm i \varphi} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \quad \text{функции } m = -\ell, \dots, \ell$$

$$\hat{L}_z Y_{\ell, \ell} = 0 \Rightarrow e^{i \varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) Y_{\ell, \ell}(\theta, \varphi) = 0$$

$$e^{i \varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \Theta_{\ell, \ell}(\theta) e^{i \ell \varphi} = 0$$

$$e^{i \varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \Theta_{\ell, \ell}(\theta) e^{i \ell \varphi} = 0$$

$$\frac{\partial \Theta}{\partial \theta} - \frac{\ell \cos \theta}{\sin \theta} \Theta = 0 \Rightarrow \frac{d\Theta}{\Theta} = \ell \frac{\cos \theta}{\sin \theta} d\theta \Rightarrow \Theta_{\ell, \ell}(\theta) = C \sin^{\ell} \theta$$

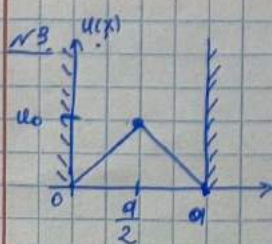
$$\Rightarrow Y_{\ell, \ell} = C \sin^{\ell}(\theta) e^{i \ell \varphi}$$

$$\hat{L}_z Y_{\ell, m}(\theta, \varphi) = \sqrt{\ell(\ell+1)(\ell-m+1)} Y_{\ell, m-1}(\theta, \varphi)$$

$$\ell=0: Y_{0,0} = C \Rightarrow C^2 \cdot 4\pi = 1 \Rightarrow Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$\ell=1: Y_{1,1} = C \sin \theta e^{i \varphi}$$

$$\Rightarrow \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} |Y_{1,1}|^2 \sin \theta d\theta d\varphi = 2\pi C^2 \int_0^{\pi} \sin^3 \theta d\theta = 2\pi C^2 \left(\frac{\cos^3 \theta}{3} - \cos \theta \right) \Big|_0^{\pi} = 2\pi C^2 \cdot \frac{4}{3} = \frac{8}{3} \pi C^2 = 1 \Rightarrow Y_{1,1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i \varphi}$$



$$U(x) = \frac{U_0}{a} (a - |2x - a|)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U_0 (a - |2x - a|) \frac{1}{a} \right) \psi = E \psi$$

Без возмущения:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = E \psi \Rightarrow \psi'' + k^2 \psi = 0$$

$$\psi(0) = 0 = \psi(a)$$

$$\psi = C_1 \cos kx + C_2 \sin kx \rightarrow \psi = A \sin kx$$

$$k = \frac{\pi n}{a} \rightarrow E_n$$

$$\int_0^a A^2 \sin^2 kx dx = A^2 \cdot \frac{a}{2} = 1 \rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

$$2x - a > 0 \rightarrow x > \frac{a}{2}$$

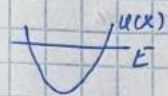
В силу периодичности т.б.:

$$E_n^{(1)} = V_{nn} = \frac{2}{a} \int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi n x}{a}\right) U_0 (a - |2x - a|) \frac{1}{a} dx = \frac{2U_0}{a^2} \left[\int_0^{\frac{a}{2}} 2x \sin^2\left(\frac{\pi n x}{a}\right) dx + \int_{\frac{a}{2}}^a (2a - 2x) \sin^2\left(\frac{\pi n x}{a}\right) dx \right] \dots$$

$$\frac{1}{0} =$$

н.л. Квадратичная и свободная части:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = [H^0 + V] \psi \quad V - \text{пер. ф.-я} \rightarrow \text{возмущение}$$

 $H\psi = E\psi$ - случай стационарной неоднородности.

В КРО: $E > 0 \rightarrow \psi_{xx} + \kappa^2(x)\psi = 0$ где $\kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)]$

В КЗО: $\psi_{xx} - \kappa^2(x)\psi = 0 \Rightarrow \kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} [U(x) - E]$

Ищем решение в виде: $\psi = A(x) e^{i\theta(x)}$

$$\psi' = (A' + i\theta' A) e^{i\theta}$$

$$\psi'' = (A'' + i\theta'' A + i\theta' A') e^{i\theta} + i\theta' (A' + i\theta' A) e^{i\theta}$$

$$\Rightarrow A'' + i\theta'' A + i\theta' A' + i\theta' A' - \theta'^2 A + \kappa^2 A = 0$$

$$A'' + 2i\theta' A' + i\theta'' A - (\theta')^2 A + \kappa^2 A = 0 \quad \text{группируем Re и Im:}$$

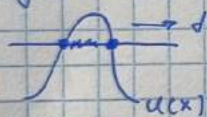
$$\begin{cases} A'' + \kappa^2 A - \theta'^2 A = 0 \\ 2A'\theta' + A\theta'' = 0 \end{cases}$$

1. $A \rightarrow \frac{\partial}{\partial x} (A^2 \theta') = 0$ отделим A''

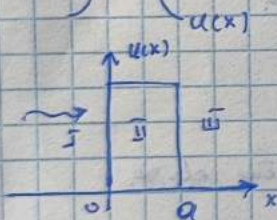
$\Rightarrow \theta'^2 = \kappa^2 \rightarrow \theta' = \pm \int \kappa dx$ и $A^2 \kappa = C \rightarrow$ тогда в КРО и КЗО получим

$$\psi = \frac{C_1}{\sqrt{\kappa}} e^{i \int \kappa dx} + \frac{C_2}{\sqrt{\kappa}} e^{-i \int \kappa dx}; \quad \psi = \frac{d_1}{\sqrt{\kappa}} e^{\int \kappa dx} + \frac{d_2}{\sqrt{\kappa}} e^{-\int \kappa dx}$$

Туннельный эффект: КРО $\rightarrow$ КЗО $\rightarrow$ КРО



$T \neq 0 \sim$ есть вер-ть прохождения через барьер.



$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= e^{i\kappa x} + A e^{-i\kappa x} \\ \psi_{II}(x) &= B e^{i\kappa x} + C e^{-i\kappa x} \\ \psi_{III}(x) &= D e^{i\kappa x} \end{aligned}$$

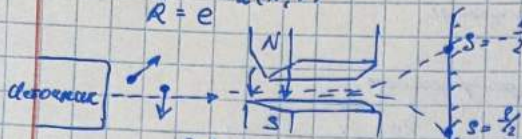
$$\kappa = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}}$$

$\rightarrow$ должны быть совп. значения ф.-ий в границ. ($E \neq 0$)

№ Оператор поперечного вращения:

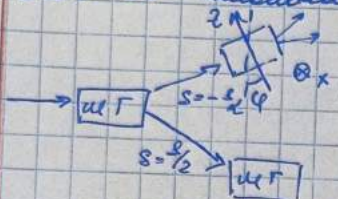
$$\hat{R} = e^{i \frac{\varphi}{2} (\vec{n} \cdot \vec{\sigma})}$$



Каждая элементарная частица в магн. пол. взаимодействует со своим магнитным диполем $\rightarrow$ как фьювэй ток

$$\vec{\mu} = \frac{e \hbar}{2mc} g \vec{S} \Rightarrow \vec{F} = (\vec{\mu} \cdot \nabla) \vec{B}$$

Если в классике мы говорим, что момент непрерывен, то на атом. уровне был дискретный момент. А в квант. мех. есть дискретность $\rightarrow$ 2 состояния



Если повернем у него будет новая ось z'

$$f(\vec{a} + \vec{b}) = A + B \vec{v}$$

$$A = \frac{f(\vec{a} + \vec{b}) + f(\vec{a} - \vec{b})}{2} = \frac{e^{i \frac{\varphi}{2}} + e^{-i \frac{\varphi}{2}}}{2} = \cos \frac{\varphi}{2}$$

$$\vec{B} = \vec{n} \cdot \frac{e^{i \frac{\varphi}{2}} - e^{-i \frac{\varphi}{2}}}{2} = i \vec{n} \sin \frac{\varphi}{2} \Rightarrow \hat{R}_\varphi = \cos \frac{\varphi}{2} + i (\vec{n} \cdot \vec{\sigma}) \sin \frac{\varphi}{2} \quad \text{для } s = 1/2$$

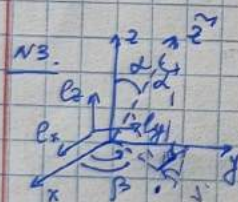
Прибор повернул отн. оси x $\Rightarrow \nabla_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

$$\Rightarrow \hat{R} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\varphi}{2} & i \sin \frac{\varphi}{2} \\ i \sin \frac{\varphi}{2} & \cos \frac{\varphi}{2} \end{pmatrix}$$

Если макс. угол: $\varphi_v = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

$$\hat{R} \varphi_v = \begin{pmatrix} \cos \frac{\varphi}{2} & i \sin \frac{\varphi}{2} \\ i \sin \frac{\varphi}{2} & \cos \frac{\varphi}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i \sin \frac{\varphi}{2} \\ \cos \frac{\varphi}{2} \end{pmatrix}$$

$$\text{Вероятности: } I_2 = \cos^2 \frac{\varphi}{2}; I_1 = \sin^2 \frac{\varphi}{2} \rightarrow I = I_1 + I_2 = 1$$



$$\hat{L}_z = \hat{L}_z \cos \alpha + \hat{L}_x \cos \beta \sin \alpha + \hat{L}_y \sin \beta \sin \alpha$$

Рисунки-оператор $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i \hat{L}_y$ и канонич. с.р.з.

$$\langle l, m | \hat{L}_\pm | l, m \rangle \sim \langle l, m | l, m \pm 1 \rangle = 0$$

$\Rightarrow$ т.к. с.р. орбитальный оператор пропорционален $\Rightarrow \hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i \hat{L}_y = 0$

т.е. $\hat{L}_x$ и $\hat{L}_y$ - редов. $\rightarrow \hat{L}_x - \hat{L}_y = 0$

$$\langle \hat{L}_z \rangle = \langle \hat{L}_z \cos \alpha \rangle = \cos \alpha \langle l, m | \hat{L}_z | l, m \rangle = m \cos \alpha$$

12. Given $S=1$

31

Answer

Унитарные соотношения: $\langle S, \vec{r} | \hat{S}_+ | S, \vec{r} - \vec{e} \rangle = \sqrt{(S+\vec{r})(S-\vec{r}+1)}$

$S=1, \vec{r} = -1, 0, 1$

$\langle S, \vec{r} - \vec{e} | \hat{S}_- | S, \vec{r} \rangle = \sqrt{(S+\vec{r})(S-\vec{r}+1)}$

$S_+ = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

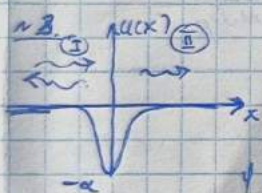
$\vec{r}' = \vec{r} - \vec{e}$

$\hat{S}_- = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$

$\begin{cases} S_x = S_+ + S_- \\ S_y = S_+ - S_- \end{cases} \Rightarrow S_x = \frac{S_+ + S_-}{2}, S_y = \frac{S_+ - S_-}{2i}$

$\hat{S}_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \hat{S}_y = \frac{1}{2i} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{i\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$

$\hat{S}_x \hat{S}_y - \hat{S}_y \hat{S}_x = i S_z$
 $S_z = \frac{1}{i} \left[\frac{1}{2i} \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \right) \right] = -\frac{1}{2} \left[\begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \right] = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \Rightarrow \hat{S}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$ and $\hat{S}_z |S, \vec{r}\rangle = \vec{r} |S, \vec{r}\rangle$



$U(x) = -\alpha \delta(x) \rightarrow \text{g.u.} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \alpha \delta(x) \psi = E \psi$

$I \propto II: \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = E \psi \rightarrow \psi'' + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = 0$

$\begin{cases} \psi_I = e^{ikx} + r e^{-ikx} \\ \psi_0 = t e^{ikx} \end{cases}$

Условия continuity:

$\begin{cases} \psi_I(0) = \psi_0(0) \\ \frac{d\psi_I}{dx}|_0 = \frac{d\psi_0}{dx}|_0 \end{cases} \Rightarrow \frac{1}{t} = \frac{1}{1+r} \Rightarrow r = t-1$

$\begin{cases} \frac{d\psi_I}{dx} = ike^{ikx} - ikr e^{-ikx} \\ \frac{d\psi_0}{dx} = ikt e^{ikx} \end{cases}$

$\Rightarrow \begin{cases} 1+r = t \\ ikt - ik + ikr = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \frac{(1+r)}{t} \end{cases} \rightarrow r = t-1$

$2ikt = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} - \frac{2m\alpha}{\hbar^2} r \Rightarrow R(ik + \frac{2m\alpha}{\hbar^2}) = -\frac{m\alpha}{\hbar^2}, R(1 + \frac{m\alpha}{ik\hbar^2}) = -\frac{m\alpha}{ik\hbar^2}$

$R(ik\hbar^2 + m\alpha) = -\frac{m\alpha}{ik\hbar^2} \Rightarrow R = \frac{-m\alpha}{ik\hbar^2 + m\alpha}$

$R(E) = ?$

$\Rightarrow R = |R|^2 = \frac{m^2 \alpha^2}{m^2 \alpha^2 + k^2 \hbar^4}; T + R = 1$

$\Rightarrow T = 1 - R = \frac{m^2 \alpha^2}{m^2 \alpha^2 + k^2 \hbar^4} = \frac{k^2 \hbar^4}{m^2 \alpha^2 + k^2 \hbar^4}$

12. Уравнение Паули:

$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - g\varphi) \psi = \frac{(\vec{p} - \frac{g}{c} \vec{A})^2}{2m} \psi - (\vec{\mu}, \vec{B}) \psi$

$S = \frac{1}{2} \Rightarrow \vec{S} = \frac{1}{2} \vec{\sigma}$

для spin-1/2: $\vec{\mu} = \frac{e\hbar}{2mc} g \vec{S} = \frac{e\hbar}{2mc} \vec{\sigma}$

$\Rightarrow (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \vec{E} \varphi) \psi = \left[\frac{(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \vec{A})^2}{2m} - \frac{e\hbar}{2mc} (\vec{\sigma}, \vec{B}) \right] \psi, \text{ где } \psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$

пусть $E=0 \Rightarrow \varphi=0$ и $\vec{B} \parallel \vec{z}_0$

$$\vec{B} = \text{rot} \vec{A} = \begin{vmatrix} \vec{x}_0 & \vec{y}_0 & \vec{z}_0 \\ \partial_x & \partial_y & \partial_z \\ A_x & A_y & A_z \end{vmatrix} \Rightarrow B_z = \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}$$

Можно выбрать $A_y = B_z x$, $A_x = 0$ или $A_x = -B_z y$, $A_y = 0 \rightarrow$ из калибровочной инвариантности $\rightarrow$ калибровка Ландау.

$$\hat{H}\psi = E\psi \Rightarrow \left[\frac{(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \vec{A})^2}{2m} - \frac{e\hbar}{2mc} (\vec{\nabla} \cdot \vec{B}) \right] \psi = E\psi$$

$$+ \left[\frac{(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + \frac{e}{c} B_y)^2}{2m} - \frac{\hbar^2 \partial^2}{2m \partial y^2} - \frac{\hbar^2 \partial^2}{2m \partial z^2} - \frac{e\hbar B}{2mc} \hat{v}_z \right] \psi = E\psi$$

Ищем в виде:

$$\psi = \Phi(y) e^{ik_x x + ik_z z}$$

$$\left[\frac{(\hbar k_x + \frac{e}{c} B_y)^2}{2m} - \frac{\hbar^2 \partial^2}{2m \partial y^2} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} - \frac{e\hbar B}{2mc} \hat{v}_z \right] \Phi(y) = E \Phi(y)$$

$$\left[\frac{(\hbar k_x + \frac{e}{c} B_y)^2}{2m} - \frac{\hbar^2 \partial^2}{2m \partial y^2} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right] \Phi(y) = \left[E + \frac{e\hbar B}{2mc} \hat{v}_z \right] \Phi(y)$$

$$\left[\frac{e^2 B^2}{2c^2 m} (y + \frac{c\hbar k_x}{eB})^2 - \frac{\hbar^2 \partial^2}{2m \partial y^2} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right] \Phi(y) = \left[E + \frac{\omega_H \hbar}{2} \hat{v}_z \right] \Phi(y)$$

$\left\{ \begin{aligned} \omega_H &= \frac{eB}{mc} \\ l_y &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_H}} \end{aligned} \right.$

$$y' = y + \frac{c\hbar k_x}{eB}$$

$$\left[\frac{e^2 B^2}{2c^2 m} y'^2 - \frac{\hbar^2 \partial^2}{2m \partial y'^2} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right] \Phi(y') = \left[E + \frac{\omega_H \hbar}{2} \hat{v}_z \right] \Phi(y')$$

$$\left[\frac{m\omega_H^2}{2} y'^2 - \frac{\hbar^2 \partial^2}{2m \partial y'^2} \right] \Phi(y') = \underbrace{\left[E + \frac{\omega_H \hbar}{2} \hat{v}_z - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right]}_{E'} \Phi(y')$$

как у гармонического ос.

$$E' = \hbar \omega_H \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

$$E + \frac{\omega_H \hbar}{2} \hat{v}_z - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} = \hbar \omega_H \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

$$E = \hbar \omega_H \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} - \frac{\omega_H \hbar}{2} \hat{v}_z$$

$$E = \hbar \omega_H \left(n + \frac{1}{2} - \frac{\hat{v}_z}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

$$\hat{v}_z = +1 \rightarrow E = \hbar \omega_H n + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

$$\hat{v}_z = -1 \rightarrow E = \hbar \omega_H (n + 1) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$