

TARTU RIIKLIK ULIKOOL

Kvantmehhaanika ülesannete kogu

KOOSTANUD R. LIAS

TARTU RIIKLIK ÜLIKOOL
Teoreetilise füüsika kateeder

KVANTMEHHAANIKA ÜLESANNETE KOGU

Koostanud R. Lias

Tartu 1966

E e s s õ n a .

Käesoleva ülesannete kogu koostamisel on aluseks võetud füüsikaosakonna jaoks kehtestatud teoreetilise füüsika programmi vastav osa. Ülesannete iseseisva lahendamise hõlbustamiseks on peaaegu kõik ülesanded varustatud suunavate märkuste ja vastustega.

Sama eesmärgi taotleavad lõpus leiduvad lisad. Lias A on konspektiivselt esitatud kvantmehhaanika põhivalemid ja lihtsamad arvutusmeetodid. Lisa B on puhtmatemaatilise iseloomuga ja piirdub vahetult ülesannete lahendamise käigus esinevate funktsioonide ja nende omaduste refereerimisega.

1. Avaldada lõpliku nihke operaator \hat{T}_a , mis on defineeritud valemiga

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

kus \vec{a} on konstantne vektor, impulsioperaatori kaudu.

Märkus: Kasutada $\psi(\vec{r} + \vec{a})$ Taylori arendust.

Vastus:

$$\hat{T}_a = e^{\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \hat{p}}.$$

2. Näidata, et lõplikus kuubikujulises piirkonnas on impulsi omafunktsioonidel kuju:

$$\psi(x, y, z) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i \frac{2\pi}{L} (n_1 x + n_2 y + n_3 z)},$$

kus L on kuubi serva pikkus ja n_1, n_2, n_3 mõnesu-
gused täisarvud, mis on seotud impulsi omaväärtustega järg-
miselt:

$$p_x = \frac{2\pi}{L} \hbar n_1, \quad p_y = \frac{2\pi}{L} \hbar n_2, \quad p_z = \frac{2\pi}{L} \hbar n_3.$$

Märkus: Arvestades perioodilisuse nõuet piirkonna äär-
tel.

3. Näidata, et impulsioperaator on hermitiline tema oma-
funktsioonide ja kõikide finitsete funktsioonide hulgal.

Märkus: Finitseteks nimetatakse funktsioone, mis on nul-
list erinevad lõplikus piirkonnas. Omafunktsioonide hermiiti-

lisusetingimus arvutada algul lõpliku kuubi korral (vt. eelmine ülesanne!) ja seejärel teostada piirprotsess $L \rightarrow \infty$.

4. Käsitledes impulssmomenti kui infinitesimaalse pöörde operaatorit, leida orbitaalse momendi komponendid \hat{M}_x , \hat{M}_y , \hat{M}_z sfäärilistes koordinaatides.

Märkus: Lähtuda skalaarse olekufunktsiooni teisenemisevalemist infinitesimaalsel pöördel:

$$\psi' = \left[1 - \frac{i}{\hbar} (\hat{M} \cdot \vec{\pi}) d\alpha \right] \psi \quad (1)$$
, kus \hat{M} on orbitaalse impulssmomenti operaator, $\vec{\pi}$ - pöördetelje ühikvektor, $d\alpha$ - infinitesimaalne pöördenurk.

Teiselt poolt, kasutades Taylori arendust,

$$\begin{aligned} \psi'(r, \vartheta, \varphi) &= \psi(r, \vartheta + d\vartheta, \varphi + d\varphi) = \\ &= \left\{ 1 + \left(\frac{d\vartheta}{d\alpha} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{d\varphi}{d\alpha} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) d\alpha \right\} \psi(r, \vartheta, \varphi). \end{aligned} \quad (2)$$

Valemite (1) ja (2) võrdlus annabki operaatori \hat{M} komponendi kuju. Arvutada tuleb $\frac{d\vartheta}{d\alpha}$ ja $\frac{d\varphi}{d\alpha}$ pöörde korral iga konkreetse telje ümber.

Näiteks pöördel z -telje ümber

$$y' = y + z d\alpha, \quad z' = z - y d\alpha,$$

kuna aga

$$z = r \cos \vartheta, \quad y = r \sin \vartheta \sin \varphi,$$

siis ühelt poolt

$$dy = z d\alpha = r \cos \vartheta d\alpha, \quad dz = -y d\alpha = -r \sin \vartheta \sin \varphi d\alpha,$$

teiselt poolt aga

$$dy = r \cos \vartheta \sin \varphi d\vartheta + r \sin \vartheta \cos \varphi d\varphi, \quad dz = -r \sin \vartheta d\vartheta.$$

Neist valemest saab avaldada

$$d\varphi = \frac{d\varphi}{d\alpha} d\alpha, \quad d\vartheta = \frac{d\vartheta}{d\alpha} d\alpha.$$

Vastus:

$$\hat{M}_x = -\frac{\hbar}{i} \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial x} + \cot \varphi \psi \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right),$$

$$\hat{M}_y = \frac{\hbar}{i} \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial x} - \cot \varphi \psi \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad \hat{M}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

5. Kontrollida järgmiste kommutatsioonieskirjade kehtivust:

$$[\hat{M}_i, \hat{x}_k] = i \hbar \varepsilon_{ikl} \hat{x}_l, \quad (1)$$

$$[\hat{M}_i, \hat{p}_k] = i \hbar \varepsilon_{ikl} \hat{p}_l, \quad (2)$$

$$[\hat{M}_i, \hat{M}_k] = i \hbar \varepsilon_{ikl} \hat{M}_l, \quad (3)$$

$$[\hat{M}, (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2)] = 0, \quad (4)$$

$$[\hat{M}, (\hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2)] = 0, \quad (5)$$

$$[\hat{M}, (\hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2)] = 0. \quad (6)$$

Valemite (1-3) ε_{ikl} on täielikult antisümmeetriline ühikvektor, s. t. $\varepsilon_{ikl} = +1$, kui (i, k, l) on saadud tsükklilise permutatsiooni teel arvudest $(1, 2, 3)$,

$\varepsilon_{ikl} = -1$, kui tsükkliline järjekord on rikutud,

$\varepsilon_{ikl} = 0$, kui mistahes 2 indeksit ühtivad.

6. Näidata, et M_z omaolekutes ψ_m on M_x ja M_y keskvaartused nullid. (Sama kehtib x , y ja p_x , p_y keskvaartuste kohta.)

Märkus: Leida keskvaartused ülesandes 5 tuletatud kommutatsioonieskirjade

$$\hat{M}_y \hat{M}_z - \hat{M}_z \hat{M}_y = i \hbar \hat{M}_x, \quad \hat{M}_z \hat{M}_x - \hat{M}_x \hat{M}_z = i \hbar \hat{M}_y$$

mõlemast pooltest, arvestades operaatori \hat{M}_z hermiitilisust.

7. Avaldada impulssmomendi \hat{z} -suunalise projektsiooni operaator operaatorite \hat{M}_x , \hat{M}_y , \hat{M}_z kaudu.

Vastus:

$$\hat{M}_{\hat{z}} = \hat{M}_x \cos(\hat{x}\hat{z}') + \hat{M}_y \cos(\hat{y}\hat{z}') + \hat{M}_z \cos(\hat{z}\hat{z}')$$

8. Kasutades ülesannete 6 ja 7 tulemusi näidata, et M_z omaolekus ψ_m on impulssmomendi \hat{z} -suunalise projektsiooni keskvärtuseks $\bar{M}_{\hat{z}} = \hbar m \cos(\hat{z}\hat{z}')$.

9. Polariseeritud osakeste voog laguneb magnetväljas $2\ell+1$ komponendiks, kus ℓ on osakese impulssmomendi ruutu iseloomustav kvantarv. Võttes $\ell=1$, leida tekkinud komponentide ($m=1, 0, -1$) suhtelised intensiivsused, kui magnetvälja suund \hat{z} moodustab impulssmomendi projektsiooni suunaga \hat{z}' nurga ν . (Impulssmomendi projektsiooni suunaks nimetatakse suunda \hat{z}' , kui enne magnetvälja sattumist iseloomustas osakese olekut \hat{M}_z mõnesugune omafunktsioon.

Märkus: Avaldada operaatorite \hat{M}^2 , \hat{M}_z omafunktsioonid $\mathcal{Y}'_{\ell,m}$ operaatorite \hat{M}^2 , \hat{M}_z omafunktsioonide $\mathcal{Y}_{\ell,m}$ kaudu. Otsitud intensiivsused saadakse arenduse kordajate ruutudest.

Normeeritud kerapinnafunktsioonid $\mathcal{Y}_{\ell,m}$ esitada kujus:

$$\mathcal{Y}_{1,1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{1}{n} (x+iy), \quad \mathcal{Y}_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{n},$$

$$\mathcal{Y}_{1,-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (x-iy);$$

$$\mathcal{Y}'_{1,1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{1}{n} (x'+iy') \text{ jne., kus } x' = x,$$

$$y' = y \cos \nu + z \sin \nu, \quad z' = z \cos \nu - y \sin \nu \quad (n' = n).$$

Vastus:

a) Kui lähteolekus $m=1$, siis

$$w(+1) = \cos^4 \frac{\lambda^2}{2}, w(0) = \frac{1}{2} \sin^2 \lambda^2, w(-1) = \sin^4 \frac{\lambda^2}{2};$$

b) kui $m = 0$, siis

$$w(+1) = \frac{1}{2} \sin^2 \lambda^2, w(0) = \cos^2 \lambda^2, w(-1) = \frac{1}{2} \sin^2 \lambda^2;$$

c) kui $m = -1$, siis

$$w(+1) = \sin^4 \frac{\lambda^2}{2}, w(0) = \frac{1}{2} \sin^2 \lambda^2, w(-1) = \cos^2 \frac{\lambda^2}{2}.$$

10. Näidata, et kahest osakesest koosneva süsteemi impulsmoment massikeske suhtes on alati risti osakesi ühendava sirgega, s. t. vastava sirge sihilise impulsmomendi projektiooni operaator on identselt null.

Märkus: Otsitav operaator on $(\vec{r} \hat{M})$, kus $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ on osakeste suhteline raadiusvektor, $\hat{M} = (\vec{r} \times \hat{p})$, $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{r}}$ - suhtelise liikumise impulss.

11. Leida operaatori $(\hat{A} - \lambda \hat{B})^{-1}$ arendus λ astmete järgi, oletades, et λ on väike arv ja operaatorid \hat{A} , \hat{B} üldjuhul ei kommuteeru.

Märkus: Esitada arendus formaalselt kujul $(\hat{A} - \lambda \hat{B})^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \hat{L}_n$, kus operaatorid \hat{L}_n on otsitavad. Võrduse mõlema poole korrutamine operaatoriga $\hat{A} - \lambda \hat{B}$ annab $1 = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n (\hat{A} - \lambda \hat{B}) \hat{L}_n$. Operaatorid \hat{L}_n leitakse λ astmete juures olevate koefitsientide võrrutamisel saadud avaldise vasakul ja paremal poolel.

Vastus:

$$(\hat{A} - \lambda \hat{B})^{-1} = \hat{A}^{-1} + \lambda \hat{A}^{-1} \hat{B} \hat{A}^{-1} + \lambda^2 \hat{A}^{-1} \hat{B} \hat{A}^{-1} \hat{B} \hat{A}^{-1} + \dots$$

12. Lineaarse harmoonilise ostsillaatori Hamiltoni operaator on $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2$, kus m on ostsilleeriva osakese mass, ω - ringsagedus. Defineerides uued operaatorid

$$\hat{P} = [m\hbar\omega]^{-\frac{1}{2}} \hat{p}, \hat{Q} = \left[\frac{m\omega}{\hbar}\right]^{\frac{1}{2}} \hat{x}$$

näidata, et kehtib võrdus

$$\hat{H}(\hat{Q} \pm i\hat{P})^n \psi_E = (E \mp n\hbar\omega)(\hat{Q} \pm i\hat{P})^n \psi_E,$$

kus ψ_E on \hat{H} omafunktsioon omaväärtusel E , s. t.

$$\hat{H}\psi_E = E\psi_E.$$

Märkus: Avaldada \hat{H} operaatorite \hat{P} ja \hat{Q} kaudu ning kasutada täieliku induktsiooni meetodil tuletatavaid kommutatsioonieeskirju:

$$[\hat{P}, (\hat{Q} \pm i\hat{P})^n] = -in(\hat{Q} \pm i\hat{P})^{n-1},$$

$$[\hat{Q}, (\hat{Q} \pm i\hat{P})^n] = \mp n(\hat{Q} \pm i\hat{P})^{n-1}.$$

13. Kasutades eelmise ülesande tulemusi näidata, et lineaarse harmoonilise ostsillaatori energia minimaalseks väärtuseks on

$$E = \frac{1}{2} \hbar \omega.$$

Märkus: Kui ψ_0 on energia minimaalsele väärtusele vastav olekufunktsioon, siis ül. 12 tulemuste põhjal

$(\hat{Q} + i\hat{P})\psi_0 = 0$. Kui sellele rakendame vasakul operaatori $(\hat{Q} - i\hat{P})$, saame energia omaväärtusvõrrandi ψ_0 jaoks.

14. Kasutades operaatorite \hat{H} , \hat{P} , \hat{Q} vahelisi kommutatsioonieeskirju näidata,

(a) et keskvärtused \bar{P} , \bar{Q} on nullid harmoonilise ostsillaatori statsionaarsetes olekutes;

(b) et minimaalse energia $E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$ olemasolu järgneb määramatuserelatsioonist.

Märkus: (a) $\bar{Q} = 0$, saadakse näiteks, kui arvutada keskvärtus operaatori \hat{H} omaolekus võrduse $\hat{H}\hat{P} - \hat{P}\hat{H} = \hbar\omega\hat{Q}$ mõlemast poolest, idades silmas operaatori \hat{H} hermitilisust.

(b) Määramatuserelatsioon $\overline{(\Delta P)^2} \overline{(\Delta Q)^2} \gg \frac{1}{4}$ asendub (a) tulemuste põhjal järgneva: $\overline{Q^2} \cdot \overline{P^2} \gg \frac{1}{4}$, millest $E \gg \frac{1}{2} \hbar \omega \left[\overline{P^2} + \frac{1}{4} (\overline{P^2})^{-1} \right]$. Tingimusest $\frac{\partial E}{\partial P^2} = 0$ määratakse $\overline{P^2}$, mis annab energiale miinimumväärtuse.

15. Leida määramatuserelatsioon operaatorite \hat{q} ja $\hat{F}(\hat{p})$ jaoks, kui on rahuldatud kommutatsioonieskiri $[\hat{p}, \hat{q}] = -i \hbar$.

Märkus: Kasutada kommutatsioonieskirja $[\hat{q}, \hat{F}(\hat{p})] = i \hbar \frac{\partial \hat{F}}{\partial \hat{p}}$, mis saadakse, kasutades $\hat{F}(\hat{p})$ jaoks Taylori arendust või allmas pidades, et impulssesituses $\hat{q} = i \hbar \frac{\partial}{\partial p}$.

Vastus: $\overline{(\Delta q)^2} \overline{(\Delta F)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4} \left| \frac{\partial F}{\partial p} \right|^2$.

16. Kasutades määramatuserelatsioone määrata K -kihi elektroni ligikaudne energia aatomis järjekorranumbriga Z . Ülesanne lahendada mitterelativistliku ja relativistliku juhu jaoks.

Märkus: K -kihi elektroni energia avaldub mitterelativistlikus lähenduses kujul: $E = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{Z e^2}{n}$. Määramatuserelatsioonist järgneb hinnang impulsi väärtuste jaoks: $p \gg \frac{\hbar}{n}$. Edasine arutluskäik on analoogiline ülesandes 14 esitatuga. Massi muutusest tingitud relativistliku paranduse leidmiseks tuleb lähtuda energia avaldisest $E \approx \sqrt{m_0^2 c^4 + c^2 p^2} - \frac{Z e^2}{n} - m_0 c^2$, kus m_0 on elektroni seisumass.

Vastus: $E \approx -\frac{Z e^2}{n} \frac{m_0 c^4}{\hbar^2}$ mitterelativistlikus lähenduses; $E \sim m_0 c^2 \left\{ (1 - \alpha^2 Z^2)^{1/2} - 1 \right\}$, $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ relativistlikul juhul.

17. Kasutades määramatuserelatsioone leida heeliumisarna-

se aatomi põhioleku energia ligikaudne väärtus, kui aatomi järjekorranumber on Z .

Märkus: Koguenergia $E = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}}$.

Määramatuserelatsioonidest järgneb hinnang impulssidele:

$$p_1 \geq \frac{\hbar}{r_1}, \quad p_2 \geq \frac{\hbar}{r_2}, \quad r_{12}^{-1} = (|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)^{-1} \geq (r_1 + r_2)^{-1}.$$

Edasi leida $E = E(r_1, r_2)$ miinimumitingimusest vastav r_1 ja r_2 väärtus.

Vastus:

$$E \sim - \left(Z - \frac{1}{4}\right)^2 \frac{m e^4}{\hbar^2} = -2 \left(Z - \frac{1}{4}\right)^2 \cdot 13,5 \text{ eV}.$$

18. Vesinikusarnases aatomis on elektroni impulssmomenti projektsioon mõnesugusele suunale mõõdetud 5%-lise täpsusega ja saadud tulemuseks $2\hbar$. Näidata, et sel juhul pole üldse võimalik määrata elektroni asimuuti orbiidil, mille tasapinna normaaliks on eelmainitud suund.

Märkus: Kasutada määramatuserelatsiooni kujul $\Delta J_z \Delta \varphi \geq \hbar$.

19. Hõbeda aatomite kimp aurustatakse temperatuuril 1200°C ja suunatakse läbi kollimaatori ekraanile, mille kaugus kollimaatorist on 1 m . Kasutades määramatuserelatsioone, hinnata ekraanil tekkinud täpi mõõtmeid.

Märkus: Kui ekraani normaali valime x -telje suunaks, siis iseloomustab täpi mõõtmeid $\Delta y \sim R \cdot \alpha$, kus R on ekraani kaugus ($= 1 \text{ m}$) ja α - aatomite hajumisnurk.

Analoogiliselt $\Delta p_y \sim p \cdot \alpha$, kus $p = \sqrt{m \kappa T}$, m on hõbeda aatomi mass, κ - Boltzmanni konstant ja T - absoluutne temperatuur. Määramatuserelatsioonist $\Delta y \cdot \Delta p_y \sim \hbar$ on leitav α suurusjärk.

Vastus: $\Delta y \sim 10^{-3} \text{ cm}.$

20. Missugused mehhaanilised suurused (energia E ; impulsi projektsioonid p_x, p_y, p_z ; impulsmomendi ruut M^2 ; paarsus P , impulssmomendi projektsioonid M_x, M_y, M_z) on jäävad

- 1) vaba osakese korral,
- 2) lõpmata pika homogeense silindri väljas,
- 3) homogeense kera väljas,
- 4) homogeense lõpmatu tasandi väljas?

Vastus: 1) $E, p_x, p_y, p_z, M_x, M_y, M_z, M^2, P$;

2) E, p_z, M_z, P (silindri telje suund on võetud z -suunaks);

3) E, M_x, M_y, M_z, M^2, P ;

4) E, p_x, p_y, M_z, P (z -telg on võetud tasandi normaaliks).

21. Leida ajast sõltuva Schrödingeri võrrandi lahend vaba osakese jaoks tasalaine kujul, analüüsida saadud lahendi füüsikalist tähendust (osakese kiirus, koordinaatide ja impulsside tõenäosuse jaotus, de Broglie seosed laineliste ja korpuskulaarsete karakteristikute vahel).

Vastus: $\psi(\vec{r}, t) = C e^{i(\vec{r}\vec{k} - \omega t)}$, $\vec{p} = \hbar \vec{k}$,
 $E = \hbar \omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, $\vec{v} = \frac{\hbar \vec{k}}{m}$.

22. Leida ühedimensionaalselt liikuva vaba osakese Schrödingeri võrrandi lahend tasalainete superpositsioonina, kui alghetkel $t=0$ kirjeldab osakest olekufunktsioon

$$\psi(x, 0) = A e^{-\frac{x^2}{2a}} + i \kappa_0 x ,$$

kus A , a , κ_0 on reaalarvulised konstandid.

Märkus: Lahendit otsida kujul

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} C(\kappa) e^{i(\kappa x - \frac{\hbar t}{2m} \kappa^2)} d\kappa.$$

Integraali

$$J = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha \xi^2 + i\beta \xi} d\xi$$

(α, β - reaalarvulised konstandid) arvutamine taandub muutujate vahetusega $\xi \rightarrow y$, $y = \xi - i \frac{\beta}{2\alpha}$, Gaussi tüüpi integraali arvutamiseks:

$$J = e^{-\frac{\beta^2}{4\alpha}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha y^2} dy = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{-\frac{\beta^2}{4\alpha}}, \quad \alpha > 0.$$

Vastus:

$$\psi(x, t) = \frac{A}{\sqrt{1 + i \frac{\hbar t}{m a^2}}} \exp \left\{ - \frac{x^2 - 2i a^2 \kappa_0 x + i \frac{\hbar a^2 \kappa_0^2}{m} t}{2 a^2 \left(1 + i \frac{\hbar t}{m a^2} \right)} \right\}.$$

23. Kasutades eelmise ülesande tulemusi, a) kontrollida määramatuserelatsiooni kehtivust koordinaadi ja impulsi vahel alghetkel $t=0$; b) näidata, et aja jooksul valgub lainepakett laiali.

Märkus: a) Määrata piirkond, kus funktsioonid $|\psi(x, 0)|^2$ ja $|C(\kappa)|^2$ on oluliselt nullist erinevad. Funktsiooni kujul $e^{-\alpha |\xi - \xi_0|}$ ($\alpha > 0$) loetakse oluliselt nullist erinevaks piirkonnas $\Delta \xi$, kus $\Delta \xi \equiv |\xi - \xi_0| \sim \frac{1}{\alpha}$.

b) Arvutada $|\psi(x, t)|^2$, mis näitab, et hetkel t on koordinaadi tõenäosimaks väärtuseks $x_0 = \frac{\kappa_0 \hbar}{m} t$, kusjuures $\Delta x = |x - x_0| \approx a \sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{m a^2} \right)^2}$.

24. Leida vaba osakese statsionaarsed olekud, kui osake liigub ühedimensionaalses piirkonnas $0 \leq x \leq a$ (lõpmata kõrge te seintega potentsiaalauk).

Märkus: Schrödingeri võrrand lahendada ääritingimustel $\psi(x)|_{x=0} = \psi(x)|_{x=a} = 0$.

Vastus:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \frac{n^2}{a^2}; \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

25. Leida lõpmata kõrgete seintega potentsiaalaugus oleva osakese (vt. eelmine ülesanne!) impulsi tõenäosuse jaotus, kui osake on n -ndal energiatasemel.

Märkus: Arendada $\psi_n(x)$ impulsi omafunktsioonide järgi ja määrata arenduse kordajate ruudud $|a_n(p)|^2$.

Vastus:

$$|a_n(p)|^2 = \frac{4\pi a}{\hbar} \frac{n^2}{\frac{p^2 a^2}{\hbar^2} - n^2 \pi^2} \begin{cases} \sin^2 \frac{pa}{2\hbar}, & \text{kui } n \text{ on paaris,} \\ \cos^2 \frac{pa}{2\hbar}, & \text{kui } n \text{ on paaritu.} \end{cases}$$

26. Määrata ülesandes 24 iseloomustatud osakese koordinaadi keskvärtus ja ruutkeskmine hälve, kui osake on n -ndal energiatasemel.

Vastus:

$$\bar{x} = \frac{1}{2} a, \quad \overline{(x - \bar{x})^2} = \frac{a^2}{12} \left(1 - \frac{6}{n^2 \pi^2} \right).$$

27. Lahendada ülesandega 24 analoogiline ülesanne, kui osake liigub 3-mõõtmelises piirkonnas $0 \leq x \leq a$, $0 \leq y \leq b$, $0 \leq z \leq c$.

Vastus:

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right),$$

$$\psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z) = \sqrt{\frac{2}{a} \cdot \frac{2}{b} \cdot \frac{2}{c}} \sin \frac{n_1 \pi x}{a} \sin \frac{n_2 \pi y}{b} \sin \frac{n_3 \pi z}{c},$$

n_1, n_2, n_3 on naturaalarvud ($= 1, 2, 3, \dots$).

28. Leida ühedimensionaalselt liikuva osakese energiatasemed $E < 0$ lõplike seintega potentsiaalaugus, s. t. juhul, kui osakese potentsiaalsel energial on järgmised väärtused:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & \text{kui } x \leq -a; \\ -U_0, & \text{kui } -a \leq x \leq +a, \quad U_0 > 0 \text{ on konstant}; \\ 0, & \text{kui } x > a. \end{cases}$$

Märkus: Schrödingeri võrrand lahendatakse eraldi kolme piirkonna $-\infty < x \leq -a$, $-a \leq x \leq +a$, ja $+a \leq x < +\infty$ jaoks. Iga üldlahend ψ_I, ψ_{II} ja ψ_{III} sisaldab 2 konstanti. ψ_I ja ψ_{III} avaldises määratakse üks konstant tingimusest, et lahendid oleksid lõplikud, kui $x \rightarrow \pm\infty$. Ülejäänud neli konstanti rahuldavad homogeenset algebralist süsteemi, mis saadakse pidevusetingimustest:

$$\begin{aligned} \psi_I &= \psi_{II} & \text{ja} & & \psi_I' &= \psi_{II}' & , & \text{kui } x = -a; \\ \psi_{II} &= \psi_{III} & \text{ja} & & \psi_{II}' &= \psi_{III}' & , & \text{kui } x = +a. \end{aligned}$$

Saadud homogeense süsteemi lahenduvuse tingimus

$$\alpha e^2 - \kappa^2 + 2\alpha \kappa \operatorname{ctg} 2\kappa a = 0, \quad (1)$$

kus $\alpha e^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$, $\kappa^2 = \frac{2m(U_0 + E)}{\hbar^2}$, annab tingimused energiatasemete määramiseks:

$$\alpha e = \kappa \operatorname{tg} \kappa a \quad (2) \quad \text{või} \quad \alpha e = -\kappa \operatorname{ctg} \kappa a. \quad (3)$$

Esimene vastab sümmeetrilistele, teine antisümmeetrilistele olekufunktsioonidele.

Seose $(\alpha e^2 + \kappa^2) a^2 = \frac{2m}{\hbar^2} U_0 a^2 = C^2$ (C^2 on potentsiaalaugu laiusel ja sügavusel sõltuv parameeter) abil taandada transsendentsed võrrandid (2) ja (3) vastavalt kujusse $f_1(\kappa a) = \operatorname{tg} \kappa a$, (4) kus $f_1(\kappa a) = \frac{1}{\kappa a} \sqrt{C^2 - (\kappa a)^2}$, ja $f_2(\kappa a) = \operatorname{tg} \kappa a$ (5), kus $f_2(\kappa a) = \kappa a [C^2 - (\kappa a)^2]^{-\frac{1}{2}}$, mis on sobivad graafiliseks lahendamiseks.

Omistades konstandile C järjest väärtusi, näiteks

$C = 1, 2, 3, \dots$, leida vastavad energilväärtused t_0 ka ja $f_1(\kappa a)$ (või vastavalt $f_2(\kappa a)$) graafikute lõikepunktidest $(\kappa a)_1, (\kappa a)_2, \dots$, jne.

29. Kasutades ülesandes 28 leitud olekufunktsioone, näidata, et a) osakese viibimise tõenäosus väljaspool piirkonda $-a \leq x \leq +a$ kahaneb eksponentsiaalselt ja on seda väiksem, mida madalamal energiatasemel on osake; b) piirjuhul, kui osake on lõpmata sügava potentsiaalaugu põhjas, s. o. $E \rightarrow -\infty$, rahuldab olekufunktsioon ääretingimusi $\psi(\pm a) = 0$ (ülesande 24 ääretingimused).

Märkus: Osakese viibimise tõenäosus piirkonnas dx punkti x ümbruses on arvutatav valemist $|\psi(x)|^2 dx$.

30. Leida ühedimensionaalse harmoonilise ostsillaatori energiatasemed ja omafunktsioonid.

Märkus: Omaväärtusprobleemi võrrandi

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 - E\right) \psi = 0 \quad (1)$$

lahendamiseks valida uus sõltumatu muutuja $x \rightarrow y = \lambda x^2$, kus $\lambda = \frac{m\omega}{\hbar}$. Seejärel kasutada polünoommeetodit, mis võimaldab lahendi esitada kujul $\psi = e^{-\frac{1}{2}y} f(y)$, kus

$$f = C_1 F\left(a; \frac{1}{2}; y\right) + C_2 y^{\frac{1}{2}} F\left(a + \frac{1}{2}; \frac{3}{2}; y\right), \quad (2)$$

$$a = \frac{1}{4} - \frac{\mu}{2}, \quad \mu = \frac{E}{\hbar\omega}. \quad (\text{Vt. lisa B!})$$

Kõrdunud hüpergeomeetrilise rea katkevuse tingimus annab

2 lahendit:

$$1) a = -n; \quad C_2 = 0; \quad n - \text{naturaalarv,}$$

$$2) a + \frac{1}{2} = -n; \quad C_1 = 0. \quad \text{Pidades silmas seoseid kõrdunud}$$

hüpergeomeetrilise funktsiooni F ja Hermite'i polünoomide

\mathcal{H}_n vahel (lisa B), võib omafunktsioonid esitada ka Hermite'i polünoomide kaudu.

Vastus:

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} e^{-\frac{1}{2} \lambda x^2} \mathcal{H}_n(\sqrt{\lambda} x).$$

31. Leida osakese energiatasemed, kui osakese potentsiaalne energia rahuldab tingimusi

$$U(x) = \begin{cases} +\infty, & \text{kui } -\infty < x \leq 0, \\ \frac{m\omega^2}{2} x^2, & \text{kui } 0 \leq x < +\infty. \end{cases}$$

Märkus: Piirkonnas $0 \leq x < \infty$ tuleb lahendada harmoonilise ostsillaatori omaväärtusülesanne. Märetingimus $\psi(x)|_{x=0} = 0$ lülitab välja ostsillaatori energiatasemed E_n , kus n on paarisarv.

$$\text{Vastus: } E_n = \hbar \omega \left(2n + \frac{3}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

32. Leida osakese energiatasemed potentsiaaliväljas

$$U(x) = \begin{cases} +\infty, & \text{kui } -\infty < x \leq 0, \\ U_0 \left(\frac{a}{x} - \frac{x}{a} \right)^2, & \text{kui } 0 \leq x < +\infty, \end{cases}$$

kus U_0 ja a on positiivsed konstandid.

Märkus: Teha muutujate vahetus $x \rightarrow \xi$, kus $\xi = \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar a} x^2$ ning kasutada polünoommeetodit.

Vastus:

$$E_n = \frac{2\hbar}{a} \sqrt{\frac{2U_0}{m}} \left\{ n + \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \left(\sqrt{\frac{8mU_0 a^2}{\hbar^2} + 1} - \sqrt{\frac{8mU_0 a^2}{\hbar^2}} \right) \right\},$$

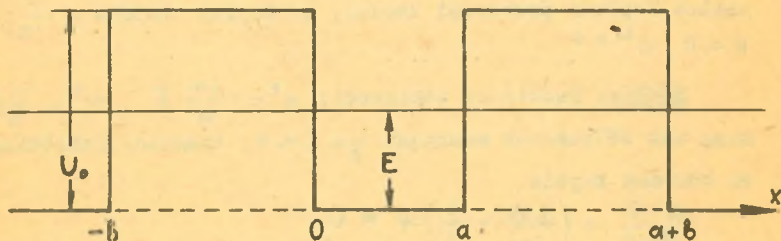
$$n = 0, 1, 2, \dots$$

33. Leida ühedimensionaalses perioodilises potentsiaalväljas liikuva osakese lubatud energiatsoonid, kui potentsiaali kuju on järgmine

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{piirkondades } nl \leq x \leq nl + a, \\ U_0 & \text{piirkondades } nl - b \leq x \leq nl, \end{cases} \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

$0 < E < U_0$; $l = a + b$ on periood.

Analüüsida lahendit madalate energiatermide jaoks kõrgete potentsiaalbarjääride korral.



Joon. 1.

Märkus: Potentsiaali perioodsuse tõttu ($U(x+l) = U(x)$) on Schrödingeri võrrand invariantne nihketeisenduse $x \rightarrow x+l$ suhtes, mistõttu lahendid $\psi(x)$ ja $\psi(x+l)$ võivad erineda vaid konstantse kordaja poolest: $\psi(x+l) = \alpha \psi(x)$ või $\psi(x+nl) = \alpha^n \psi(x)$. Selleks, et lahend x -telje positiivses suunas ei kasvaks lõpmatuseni, peab α olema faasikordaja mõttega, s. t. $\alpha = e^{i\tau l}$, kus τ on reaalarv. Lahendid leida eraldi näiteks piirkondade $-b \leq x \leq 0$, $0 \leq x \leq a$ ja $a \leq x \leq a+b$ jaoks nõudes ψ ja ψ' pidevust punktides 0 ja a .

Vastus: Üldjuhul

$$| \operatorname{ch} \kappa b \cdot \cos \kappa a + \frac{\kappa^2 - k^2}{2\kappa k} \operatorname{sh} \kappa b \cdot \sin \kappa a | = | \cos \tau l | \leq 1,$$

kus $\kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$, $\kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)$.

Kui $\kappa b \gg 1$, siis

$$\left| \frac{1}{2} \cos ka + \frac{\alpha e^2 - k^2}{4 \alpha e k} \sin ka \right| \ll 1;$$

mida madalamad on energiatermid, seda kitsamad on lubatud tsoonid.

34. Leida energiaspekter ja omafunktsioonid ühedimensionaalse Kepleri probleemi korral, s. t., kui $U(x) = -\frac{e^2}{|x|}$, $E < 0$, $e^2 > 0$.

Märkus: Kasutades tähistusi: $k^2 = -\frac{2m}{\hbar^2} E$, $\alpha e^2 = \frac{m e^2}{\hbar^2 k}$ ning uut sõltumatut muutujat $y = 2kx$, taandada Schrödingeri võrrand kujule

$$\frac{d^2 \psi}{dy^2} + \left(\frac{2\alpha e}{|y|} - \frac{1}{4} \right) \psi = 0.$$

Piirkonnas $y > 0$ annab asendus $\psi(y) = e^{-\frac{1}{2}y} f(y)$ (1)

$f(y)$ jaoks võrrandi

$$y f'' - y f' + 2\alpha e f = 0,$$

mille lahendiks on $f = y F(-2\alpha e + 1; 2; y)$. (2)

Piirkonnas $y < 0$ saame analoogilise tulemuse asendusega $y = -z$, $z > 0$.

Lahend (1,2) on regulaarne, kui $-2\alpha e + 1 = -n$, kus n on naturaalarv (0, 1, 2, ...).

Vastus:

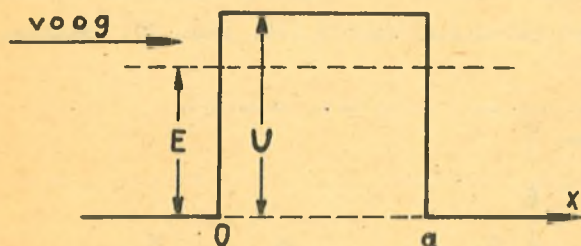
$$E_n = -\frac{m e^4}{2 \hbar^2} \frac{1}{(n+1)^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\psi_n(\xi) = \begin{cases} 2 e^{-\frac{\xi}{2(n+1)}} \frac{\xi}{n+1} F(-n; 2; 2 \frac{\xi}{n+1}), & \xi > 0, \\ 2 e^{\frac{\xi}{2(n+1)}} \frac{\xi}{n+1} F(-n; 2; -2 \frac{\xi}{n+1}), & \xi < 0, \end{cases}$$

$\xi = \frac{x}{a}$, kus $a = \frac{\hbar^2}{m e^2}$ on Bohri raadius.

35. Vabade osakeste voog langeb potentsiaalbarjäärile lausega a ja kõrgusega U . Leida barjääri läbimise ja

barjäärilt peegeldumise koefitsient. Ülesanne lahendada eraldi kahel juhul, kui osakeste energia $E < U$ ja kui $E > U$.



Joon. 2.

Märkus: Osakeste liikumise suund valida x -telje suunaks ja lahendada Schrödingeri võrrand statsionaarse oleku jaoks eraldi kolmes piirkonnas:

I: $-\infty < x \leq 0$, II: $0 \leq x \leq a$, III: $a \leq x < +\infty$.

Piirkonnas III tuleb üldlahendist eraldada erilahend, mis vastab osakeste liikumisele ainult x -telje positiivses suunas (selles piirkonnas peegeldunud osakesed puuduvad). Punktides $x=0$ ja $x=a$ arvestada pidevusetingimust. Barjääri läbimise koefitsient D on läbinud osakeste voo tiheduse ja pealelangenud osakeste voo tiheduse suhe; peegeldumise koefitsient R vastavalt peegeldunud ja pealelangenud osakeste voo tiheduste suhe.

Vastus: a) Kui $E < U$, siis

$$D = \left\{ 1 + \frac{1}{4} \left(\lambda + \frac{1}{\lambda} \right)^2 \hbar^2 \alpha a \right\}^{-1}, \quad R = \frac{\frac{1}{4} \left(\lambda + \frac{1}{\lambda} \right)^2 \hbar^2 \alpha a}{1 + \frac{1}{4} \left(\lambda + \frac{1}{\lambda} \right)^2 \hbar^2 \alpha a},$$

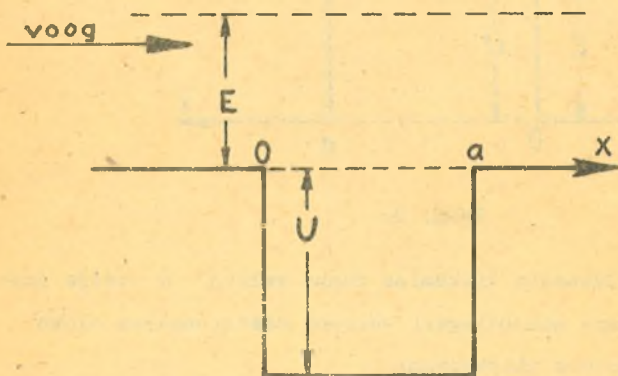
kus $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (U - E)$, $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$, $\lambda = \frac{\alpha}{k}$;

b) kui $E > U$, siis

$$D = \left\{ 1 + \frac{1}{4} \left(\mu - \frac{1}{\mu} \right)^2 \sin^2 \mathcal{K} a \right\}^{-1}, \quad R = \frac{\frac{1}{4} \left(\mu - \frac{1}{\mu} \right)^2 \sin^2 \mathcal{K} a}{1 + \frac{1}{4} \left(\mu - \frac{1}{\mu} \right)^2 \sin^2 \mathcal{K} a},$$

kus $\mu = i\lambda$, $\mathcal{K} = i\kappa$.

36. Lahendada eelmisega analoogiline ülesanne, kui osakeste voog langeb potentsiaalaugule (vt. joon. 3). Näidata,



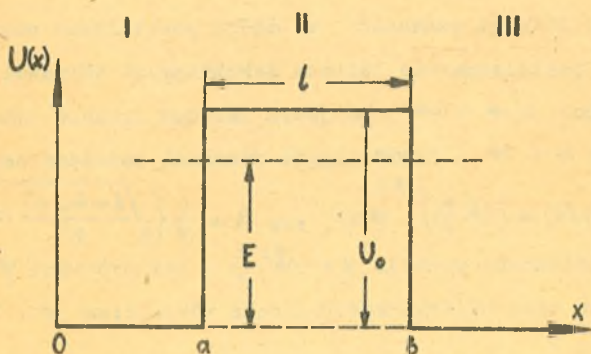
Joon. 3.

et ka sel juhul on peegeldumiskoeffitsient nullist erinev. Leida, missuguste energiatega korral on osakese viibimise tõenäosus potentsiaalaugus maksimaalne (või minimaalne).

Vastus: Tõenäosus osakese viibimiseks potentsiaalaugus on maksimaalne, kui $\mathcal{K} a = \pi n$, ja minimaalne, kui $\mathcal{K} a = (n + \frac{1}{2})\pi$. n on täisarv, \mathcal{K} on defineeritud ül. 35 vastuses.

37. Leida osakese olekufunktsioon joonisel 4 esitatud potentsiaaliväljas $U(x)$. Analüüsida sisepiirkonna (piirkond I) laine amplituudi A suhet barjäärile langeva ja barjää-

rilt eemalduva laine amplituudisse (B ja $C = 1$ vastavalt) sõltuvalt osakese energiast E , kui potentsiaalbarjäär on vähe läbilaskev. Näidata, et üldjuhul $|A| \ll 1$, kuid teatud resonantsenergiate korral $|A| \gg 1$.



Joon. 4.

Märkus: Vähe läbilaskev potentsiaalbarjäär on iseloomustatud tingimusega $\alpha l \gg 1$, kus $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)$. Schrödingeri võrrand lahendada eraldi kolme piirkonna jaoks, arvestades pidevusetingimusi punktides a ja b ning tingimust $\psi(0) = 0$. Üks meelevaldseks jäänud konstante, näiteks potentsiaalbarjäärilt eemalduva laine amplituud, võrrutada ühega.

Vastus:

$$\frac{A}{4} e^{\alpha l} \left\{ \left(1 + \frac{\alpha}{i\kappa} \right) (\sin \kappa a + \frac{\alpha}{\kappa} \cos \kappa a) + \left(1 - \frac{\alpha}{i\kappa} \right) (\sin \kappa a - \frac{\alpha}{\kappa} \cos \kappa a) e^{-2\alpha l} \right\} = 1, \quad \kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E.$$

Kui $\alpha l \gg 1$, siis resonantstingimusel on kuju

$$\sin \kappa a + \frac{\alpha}{\kappa} \cos \kappa a = 0$$

ning $|A_{\max}|^2 = 4 e^{-2\alpha l}$.

38. Leida läbimiskoeffitsient D , kui osakeste voog langeb potentsiaalbarjäärile $U(x) = \frac{U_0}{\cosh^2 \frac{x}{a}}$, kus U_0 ja a on positiivsed konstandid. Osakeste energia E rahuldagu tingimust: $0 < E < U_0$.

Märkus: Liikugu osakesed x -telje positiivses suunas. Siis vastab pealelangevale lainele Schrödingeri võrrandi lahend piirjuhul $x \rightarrow -\infty$, barjääri läbinud lainele lahend piirjuhul $x \rightarrow +\infty$. Schrödingeri võrrandi lahendamiseks teha asendus $\psi(x) = \left(\cosh \frac{x}{a}\right)^{-2\lambda} \varphi(x)$, kus $\lambda = \frac{1}{4} \left\{ \sqrt{\frac{8mU_0 a^2}{\hbar^2} + 1} - 1 \right\}$ ja valida uus sõltumatu muutuja $z = -\sinh^2 \frac{x}{a}$. Lainevõrrand $\varphi(z)$ jaoks taandub siis hüpergeomeetriliseks võrrandiks (vt. lisa B1).

Vastus:

$$D = \frac{\sinh^2 \pi k a}{\sinh^2 \pi k a + \cos^2 \left(\frac{\pi}{2} \sqrt{1 - \frac{8mU_0 a^2}{\hbar^2}} \right)}, \text{ kui } \frac{8mU_0 a^2}{\hbar^2} < 1,$$

$$D = \frac{\sinh^2 \pi k a}{\sinh^2 \pi k a + \cosh^2 \left(\frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{8mU_0 a^2}{\hbar^2} - 1} \right)}, \text{ kui } \frac{8mU_0 a^2}{\hbar^2} > 1.$$

39. Kasutades pidevuse võrrandit näidata, et meelevaldse kujuga ühedimensionaalse potentsiaalbarjääri korral kehtib tingimus

$$R + D = 1,$$

kus R on peegeldumiskoeffitsient, D - läbimiskoeffitsient.

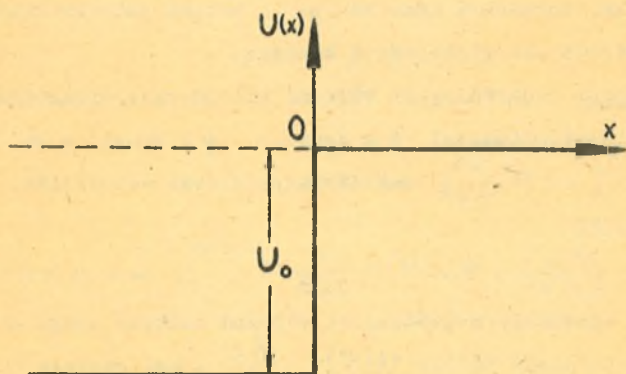
Märkus: Pidevuse võrrandist järgneb ühedimensionaalse liikumise statsionaarsete olekute jaoks $\vec{j} = jx = \text{konst}$. j_x arvutamiseks tuleb kasutada lainefunktsioonide asümptootilist kuju:

$$\psi_{x \rightarrow \infty} = A e^{i\kappa x}, \quad \psi_{x \rightarrow -\infty} = e^{i\kappa x} + B e^{-i\kappa x},$$

kui osakeste voog liigub x -telje positiivses suunas.

40. Näidata, et elektronide emissiooni korral peegeldub metalli pinnalt osa elektrone alati metalli tagasi. Lihtsus-
tuseks võtta potentsiaal joonisel 5 esitatud kujul, s. o.

$$U(x) = \begin{cases} -U_0, & x \leq 0, \\ 0, & x > 0. \end{cases}$$



Joon. 5.

Veenduda selles, et elektronid energiaga $E \leq 0$ peegelduvad kõik tagasi.

Märkus: Ülesanne taandub peegeldumiskoeffitsiendi R määramiseks. Arvutus annab:

$$R = \left(\frac{\alpha - \kappa}{\alpha + \kappa} \right)^2, \quad \text{kus} \quad \alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 + E), \quad \kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E.$$

41. Pikas orgaanilises molekulis mõjub elektronile väli, mida esimeses lähenduses võib lugeda silindersümmeetriliseks, s. t. $U(\vec{r}) = U(\varphi)$, kus φ on kaugus silindri teljest. Analüüsida Schrödingeri võrrandit silinderkoordinaatides ja näidata, et elektroni impulssmomendi projektsiooni väärtused silindri teljele on kvantiseeritud.

42. Leida tasapinnalise jäiga rotaatori statsionaarsed olekud, kui rotaatori mass on μ , kaugus pöörlemisteljest a . Määrata energiatasemete kordsus.

Märkus: Schrödingeri võrrand silinderkoordinaatides taandub lisatingimustel $z = \text{konst.}$, $\varphi = \text{konst.} = a$ operaatori $\hat{J}_z^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$ omaväärtusprobleemi võrrandiks.

Vastus:

$$E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2\mu a^2}, \quad \psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

43. Lahendada Schrödingeri võrrand osakese jaoks silindersümmeetrilises väljas $U(\vec{r}) = -\frac{Ze^2}{\rho}$, kui osakese energia $E < 0$.

Märkus: Kasutades ülesande 41 tulemusi, otsida lahendit kujul $\psi(\rho, \varphi, z) = V(\rho)\phi(\varphi)Z(z)$. Asendusega $V(\rho) = \rho^{-\frac{1}{2}} f(\rho)$ saadakse $f(\rho)$ jaoks võrrand

$$f'' + \left(-\kappa^2 + \frac{2k\beta}{\rho} - \frac{\mu^2 - \frac{1}{4}}{\rho^2}\right) f = 0, \quad (1)$$

kus $\kappa^2 = -\frac{2m}{\hbar^2} E$, $\beta = \frac{mZe^2}{k\hbar^2}$, $\mu = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$
 Võrrand (1) lahendada polünoommeetodil, mis võimaldab otsida $f(\rho)$ kujus: $f(\rho) = \rho^{\mu + \frac{1}{2}} e^{-\gamma\rho} \tau(\rho)$, kus $\tau(\rho)$ rahuldab kõdunud hüpergeomeetrilise funktsiooni võrrandit (vt. lisa B1).

Vastus:

$$E = - \frac{m Z^2 e^4}{2 \hbar^2 (n + \mu + \frac{1}{2})^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\psi(\varrho, \varphi) = e^{i\mu\varphi} \varrho^\mu e^{-\gamma\varrho} F(-n; 2\mu+1; 2\gamma\varrho).$$

44. Leida osakese statsionaarsed olekud lõpmata kõrgete seintega kahemõõtmelises potentsiaalugus, mida iseloomustab potentsiaal

$$u(\varrho) = \begin{cases} 0, & \text{kui } \varrho \leq a, \\ \infty, & \text{kui } \varrho > a. \end{cases} \quad (\varrho^2 = x^2 + y^2)$$

Märkus: Schrödingeri võrrand lahendada silinderkoordinaatides. Võrrand radiaalosa $\mathcal{V}(\varrho)$ jaoks taandub Besseli võrrandiks, millele tuleb leida lahend, mis on regulaarne nullpunktis (vt. lisa B!).

Vastus:

$$E = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \left[\lambda_n^{(\mu)} \right]^2,$$

$$\psi(\varrho, \varphi) = C_n^{(\mu)} J_\mu \left(\lambda_n^{(\mu)} \frac{\varrho}{a} \right) e^{i\mu\varphi},$$

kus $\lambda_n^{(\mu)}$ on võrrandi $J_\mu(\kappa a) = 0$ n -nes juur, $C_n^{(\mu)}$ - normeerimiskonstant, $\kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$.

45. Näidata, et konstandi U_0 lisamisel osakese potentsiaalsele energiale $U(\vec{r})$ muutub ainult statsionaarset olekut kirjeldava funktsiooni ajast sõltuv osa. Kuidas?

46. Leida osakese statsionaarsed olekud lõpmata paksude seintega õõneskeras, s. t. potentsiaaliväljas

$$u(r) = \begin{cases} 0, & \text{kui } r \leq a, \\ \infty, & \text{kui } r > a. \end{cases}$$

Määrata energilaväärtused piirjuhul $\kappa a \gg 1$, kus $\kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$.

Märkus: Kasutades sfäärilisi koordinaate r, ϑ, φ , taandada asendusega $R(r) = r^{-\frac{1}{2}} \chi(r)$ radiaalosa võrrand Besseli võrrandiks ja leida selle lahend, mis oleks nullpunktis regulaarne (vt. lisa B!). Piirjuhu $\kappa a \gg 1$ analüüsimiseks kasutada Besseli funktsioonide asümptootilist kuju

$$J_{\ell + \frac{1}{2}}(\kappa r) \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi \kappa r}} \sin\left(\kappa r - \frac{\pi \ell}{2}\right).$$

Vastus:

$$E = \frac{\hbar^2}{2ma^2} (\kappa_n^{(\ell)} a)^2,$$

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = C_{\ell, n} r^{-\frac{1}{2}} J_{\ell + \frac{1}{2}}\left(\kappa_n^{(\ell)} \frac{r}{a}\right) P_{\ell}^{|\ell|}(\cos \vartheta) e^{im\varphi},$$

kus $\kappa_n^{(\ell)}$ on võrrandi $J_{\ell + \frac{1}{2}}(\kappa a) = 0$ n-nes juur.

$$\kappa_n^{(\ell)} \rightarrow \frac{1}{a} \left(n\pi + \frac{\ell\pi}{2} \right), \quad \text{kui } \kappa a \gg 1.$$

47. Määrata osakese diskreetne energiaspekter, kui osake viibib tsentraalsümmeetrilises potentsiaalaugus kujuga

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & \text{kui } r \leq a, \\ 0, & \text{kui } r > a \end{cases}$$

ja osakese impulssmoment on null.

Leida, missugusel tingimusel võivad seotud olekud, s. t. olekud energiaga $E < 0$ üldse esineda.

Märkus: Asendusega $R(r) = r^{-1} f(r)$ taandada radiaalosa võrrand ühedimensionaalse liikumise võrrandiks potentsiaalaugus

$$U(r) = \begin{cases} \infty, & \text{kui } r < 0, \\ -U_0, & \text{kui } 0 \leq r \leq a, \\ 0, & \text{kui } r > a. \end{cases}$$

Regulaarsuse nõudeid rahuldavad lahendid

$$f(r) = A \sin \kappa r, \quad 0 \leq r \leq a;$$

$$f(r) = B e^{-\kappa r}, \quad r > a,$$

kus

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

$$\kappa^2 + \alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} U_0.$$

Kui κ avaldada α kaudu, siis tema reaalsusetingimus annab $U_0 a^2$ miinimumväärtuse.

Vastus:

$$\alpha a \operatorname{ctg} \alpha a = -\kappa a, \quad U_0 a^2 > \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m}.$$

48. Lahendada eelmine ülesanne, kui osakese impulssmomenti iseloomustab kvantarv $\ell = 1$. Näidata, et siis võivad seotud olekul esineda ainult tingimusel $U_0 a^2 > \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m}$. Leida füüsikaline seletus, miks $U_0 a^2$ peab suurenema ℓ suurenemisel.

Märkus: Radiaalosa võrrand taandada ülesandes 45 kasutatud asendusega Besseli võrrandiks. Siis sisepiirkonnas ($0 \leq r \leq a$) avaldub regulaarne lahend Besseli funktsioonide $J_{\ell + \frac{1}{2}}$ kaudu, välispiirkonnas ($a \leq r < \infty$) - esimest liiki Hankeli funktsioonide $\mathcal{H}_{\ell + \frac{1}{2}}^{(1)}$ kaudu (vt. lisa B!). Funktsiooni pidevuse nõudeist leida energia määramise tingimus.

Vastus:

$$\frac{\operatorname{ctg} \alpha a}{\alpha a} = \frac{1}{(\kappa a)^2} + \frac{1}{\kappa a} + \frac{1}{(\kappa a)^2},$$

$$(\alpha a)_{\min} |_{\ell=1} > (\alpha a)_{\min} |_{\ell=0}, \quad (\text{vt. järgmine ülesanne!}).$$

49. Näidata, et tsentraalsümmeetrilises väljas viibiva seotud osakese energia miinimum kasvab kvantarvu ℓ kasvamisel.

Märkus: Arvestades, et tsentraalsümmeetrilises väljas kehtib kindlale l väärtusele vastavate energia omafunktsioonide ψ_l korral seos

$$\hat{H}\psi_l = \left(\hat{H}_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \psi_l, \quad \hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + U(r),$$

avaldada

$$(E_l)_{\min} = \int \psi_l^* \left\{ \hat{H}_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} \psi_l dV.$$

Analoogiliselt avaldada $(E_{l+1})_{\min}$ ja veenduda, et $(E_{l+1})_{\min} > (E_l)_{\min}$.

50. Süsteem koosneb kahest osakesest massidega m_1 ja m_2 vastavalt. Võttes kasutusele masskeskmekoordinaadid $\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}$ ja suhtelised koordinaadid $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$, avaldada nende kaudu summaarse impulsi $\hat{p} = \hat{p}_1 + \hat{p}_2$ ja summaarse orbitaalse momendi $\hat{M} = \hat{M}_1 + \hat{M}_2$ operaator.

Vastus:

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla_R, \quad \hat{M} = [\vec{R} \times \frac{\hbar}{i} \nabla_R] + [\vec{r} \times \frac{\hbar}{i} \nabla_r].$$

51. Sõltugu kahest osakesest koosneva süsteemi potentsiaalne energia ainult osakeste suhtelistest koordinaatidest, s. t. $U(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = U(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$. Kasutades eelmises ülesandes defineeritud koordinaate \vec{R} ja \vec{r} , taandada Schrödingeri võrrand kaheks ühe osakese võrrandiks, millest üks vastab massikeskme tungivabale liikumisele (kogumass $M = m_1 + m_2$), teine kirjeldab seotud osakest taandatud massiga $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$.

Märkus: Süsteemi Schrödingeri võrrandis teostada koordinaatide teisendus $\vec{r}_1, \vec{r}_2 \rightarrow \vec{R}, \vec{r}$ ja otsida lahendit

$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ kujul

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi(\vec{R}) \varphi(\vec{r}).$$

Vastus:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_R \psi(\vec{R}) = E_1 \psi(\vec{R}),$$

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_n + U(r) \right\} \varphi(\vec{r}) = E_2 \varphi(\vec{r}); \quad E_1 + E_2 = E.$$

52. Leida ruumilise jäiga rotaatori statsionaarsed ole-
kud, kui rotaatorit iseloomustab inertsmoment J ($J = ma^2$,
 a - kaugus pöörlemistsentrist).

Märkus: Schrödingeri võrrand sfäärilistes koordinaati-
des taandub tingimusel $r = a$, $U = 0$ operaatori \hat{M}^2
omaväärtusprobleemi võrrandiks.

Vastus:

$$E_\ell = \frac{\hbar^2}{2J} \ell(\ell+1); \quad \psi_{\ell, m}(\vartheta, \varphi) = Y_{\ell, m}(\vartheta, \varphi).$$

53. Lahendada Schrödingeri võrrand kerasümmeetrilise har-
moonilise otsillaatori jaoks, mida iseloomustab potentsiaalne
energia $U(r) = \frac{m\omega^2}{2} r^2$.

Märkus: Ülesanne lahendada sfäärilistes koordinaatides.
Kasutades uut radiaalmuutujat $\xi = \frac{m\omega}{\hbar} r^2$ ja seejärel pelü-
noomeetodit, taandada radiaalosa võrrand kõdunud hüpergeomeet-
rilise funktsiooni võrrandiks (vt. lisa B!).

$$\text{Vastus: } E_{n_\ell, \ell} = \hbar\omega \left(\ell + 2n_\ell + \frac{3}{2} \right) = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = \ell + 2n_\ell + 1;$$

$$\psi_{n_\ell, \ell, m}(\vartheta, \varphi) = C e^{-\frac{\lambda}{2} r^2} r^\ell F(-n_\ell; \ell + \frac{3}{2}; \lambda r^2) Y_{\ell, m}(\vartheta, \varphi);$$

$$\lambda = \frac{m\omega}{\hbar}; \quad \ell = 0, 1, 2, \dots; \quad n_\ell = 0, 1, 2, \dots;$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

54. Näidata, et ülesanne 53 on lahendatav ka Cartesiuse
koordinaatides muutujate eraldamise meetodil (vt. ülesanne 30).
Fähistades vastavad omafunktsioonid

$$\phi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z) = \psi_{n_1}(x) \psi_{n_2}(y) \psi_{n_3}(z),$$

veenduda, et impulssmomenti ruudu omafunktsioonideks on teatud ϕ_{n_1, n_2, n_3} lineaarkombinatsioonid. (Piirduda juhuga $l=1, n_2=0$).

Märkus: Funktsioon $\psi_{n_1, l, m}$ ülesandest 53, kus $n_2=0, l=1$, arendada funktsioonide $\phi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z)$ järgi, kusjuures kvantarvud n_1, n_2, n_3 peavad rahuldama tingimust $n_1 + n_2 + n_3 = 1$. Vastavate ϕ_{n_1, n_2, n_3} kuju leida ülesande 30 vastusest ja lisast B.

Vastus:

$$\psi_{0, 1, 1} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_{1, 0, 0} + i \phi_{0, 1, 0}),$$

$$\psi_{0, 1, 0} = \phi_{0, 0, 1},$$

$$\psi_{0, 1, -1} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_{1, 0, 0} - i \phi_{0, 1, 0}).$$

55. Oletades, et kerges tuumas võime nukleoni potentsiaalse energia aproksimeerida funktsiooniga $U(n) = -U_0 + \frac{m\omega^2}{2} n^2$, kus U_0 on konstant, määrata sama liiki nukleonide arv täidetud kihis.

Märkus: Pauli printsibi põhjal võib samas koordinaatolekus viibida ainult 2 sama liiki nukleoni. Seega tuleb määrata antud energiatasemele vastavate sõltumatute omafunktsioonide arv ja see korrutada kahega.

Kuna potentsiaalne energia on oluliselt sama mis ülesandes 53, võib kasutada seal leitud vastust. Tähistades $1 + l + 2n_2 = n$, määrata funktsioonide $\psi_{n_1, l, m}$ arv fikseeritud n korral.

Vastus: Arvuga n määratud kihis võib olla $(n+1)n$ sama liiki nukleoni.

56. Kasutades eelmise ülesande tulemusi, leida, missugused kihid (n väärtused!) esinevad He_2^4 ja O_8^{16} tuumades. Arvutada nukleonide tiheduse jaotused $\rho(\vec{r})$ ja leida tingimusest $\left. \frac{\partial^2 \rho}{\partial r^2} \right|_{r=R} = 0$ tuumade raadiused R .

Märkus: $\rho(\vec{r})$ arvutada valemist $\rho(\vec{r}) = \sum_{n, \ell, m} |\psi_{n, \ell, m}|^2$, kus summeerida tuleb fikseeritud n korral üle kõikide võimalikkude n_ℓ ja m väärtuste ($\ell = n - 2n_\ell - 1$). Mitme kihi korral summeerida ka üle n . Funktsioonid $\psi_{n, \ell, m}$ on antud ülesande 53 vastuses. Tuuma raadiuse määrab punkt $r = R$, kus tiheduse langus on kõige järsem.

Vastus: He_2^4 puhul

$$\rho(\vec{r}) = \frac{4}{(n_0 \sqrt{2\pi})^3} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{r}{n_0}\right)^2}, \quad R = n_0;$$

O_8^{16} puhul

$$\rho(\vec{r}) = \frac{4}{(n_0 \sqrt{2\pi})^3} \left\{ 1 + \left(\frac{r}{n_0}\right)^2 \right\} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{r}{n_0}\right)^2}, \quad R = 3,73 n_0,$$

kus

$$n_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}.$$

57. Lahendada Schrödingeri võrrand elektroni jaoks vesinikusarnases aatomis, kasutades paraboolseid koordinaate ξ, η, φ , kus $x = \sqrt{\xi\eta} \cos\varphi$, $y = \sqrt{\xi\eta} \sin\varphi$, $z = \frac{1}{2}(\xi - \eta)$; $0 \leq \xi, \eta < \infty$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$.

Märkus: Laplace'i operaator Δ paraboolseis koordinaatides on

$$\Delta = \frac{4}{\xi + \eta} \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \right\} + \frac{1}{\xi\eta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2},$$

$n = \frac{1}{2}(\xi + \eta)$. Kui otsida Schrödingeri võrrandi lahendit kujul

$$\psi = f_1(\xi) f_2(\eta) e^{im\varphi},$$

siis rahuldavad f_1 ja f_2 vastavalt võrrandeid:

$$\frac{d}{d\xi} \left(\xi \frac{df_1}{d\xi} \right) - \left(\frac{m^2}{4\xi} + \frac{\mu |E| \xi}{2\hbar^2} - \frac{Ze^2}{\hbar^2} + \lambda \right) f_1 = 0, \quad (1)$$

$$\frac{d}{d\eta} \left(\eta \frac{df_2}{d\eta} \right) - \left(\frac{m^2}{4\eta} + \frac{\mu |E| \eta}{2\hbar^2} - \lambda \right) f_2 = 0, \quad (2)$$

kus λ on muutujate eraldamise konstant. Võrrandid (1) ja (2) lahendada polünoommeetodil.

Vastus:

$$E_n = - \frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2}, \quad n = n_1 + n_2 + |m| + 1,$$

$$\psi_{n_1, n_2, m}(\xi, \eta, \varphi) = e^{-\frac{\alpha}{2}(\xi + \eta)} (\xi \eta)^{\frac{|m|}{2}}.$$

$$L_{n_1+|m|}^{|m|}(\alpha\xi) L_{n_2+|m|}^{|m|}(\alpha\eta) e^{im\varphi},$$

kus $\alpha = \frac{\mu Z e^2}{\hbar n}$, $L_n^s(x)$ on Laguerre'i polünoomid, n_1, n_2 on parabolised kvantarvud, $0 \leq n_1, n_2 \leq n-1$.

58. Näidata, et elektroni keskmine potentsiaalne energia vesinikusarnase aatomi n -ndal energiatasemel avaldub kujul: $\bar{U} = - \frac{Z^2 e^2}{a_0 n^2}$, kus a_0 on Bohri raadius, $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$. Sellest tulemusest lähtudes leida keskmine kinetiline energia.

Märkus: $\bar{U} = -Z e^2 \left(\frac{1}{n} \right)$ leidmiseks kasutada normeerimisintegraali Laguerre'i polünoomide jaoks (vt. lisa B1). E_{kin} leidmisel lähtuda E_n valemist.

Vastus:

$$E_{kin} = \frac{Z e^2}{2 a_0 n^2}.$$

59. Kasutades vesinikusarnases aatomis viibiva elektroni energia omafunktsiooni $\psi_{1,0,0}$, näidata, et Bohri raadius $\frac{a_0}{2}$ (vt. eelmine ülesanne!) annab elektroni tõenäoselma kauguse tuumast.

60. Näidata, et vesiniku aatomi põhiolekus kehtivad järgmised seosed:

$$\frac{1}{r} = \frac{1}{a}, \quad \overline{\frac{1}{r^2}} = \frac{2}{a^2}, \quad \text{kus } a = \frac{\hbar^2}{m e^2}.$$

61. Arvutada ruutkeskmine hälve $\overline{r^2 - (\bar{r})^2}$ vesiniku aatomi elektroni jaoks, mille olekut iseloomustavad kvantarvud n, l .

Vastus:

$$\overline{r^2 - (\bar{r})^2} = \frac{1}{4} \{ n^2(n^2+2) - l^2(l+1)^2 \}.$$

62. Lähtudes vesinikusarnase aatomi omaväärtusprobleemi lahendist parabolsetes koordinaatides (ül. 57), näidata vahetult, et n -nes energiatase on n^2 -kordselt kõdunud.

63. Avaldada vesiniku aatomi olekufunktsioon parabolsetes koordinaatides

$$\psi_{n_1, n_2, m}(\xi, \eta, \varphi)$$

olekufunktsioonide kaudu sfäärilistes koordinaatides

$$\psi_{n, l, m}(r, \vartheta, \varphi)$$

Veenduda selles, et

$$\psi_{n_1, n_2, m}(\xi, \eta, \varphi) = \psi_{n, l, m}(r, \vartheta, \varphi),$$

kui $n_1 = 0, n_2 = 0, m = n-1; l = n-1, m = n-1$.

Märkus: Avaldada parabolsetes koordinaatides ξ, η, φ sfääriliste r, ϑ, φ kaudu ülesandes 57.

Vastus:

$$\psi_{1,0,0}(r, \vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2}} R_{20}(r) Y_{00}(\vartheta, \varphi) + \frac{1}{\sqrt{2}} R_{21}(r) Y_{10}(\vartheta, \varphi).$$

64. Elektroni statsionaarsed olekut vesiniku aatomis iseloomustavad paraboolsed kvantarvud $n_1=1$, $n_2=0$ ja magnetiline kvantarv $m=0$ (vt. ül. 63). Leida elektroni impulssmomendi ruudu tõenäosuse jaotus nimetatud olekus.

Vastus: $W|_{l=0} = \frac{1}{2}$, $W|_{l=1} = \frac{1}{2}$, kus W tähistab tõenäosust.

65. Ruumilist jäika rotaatorit (vt. ül. 52) iseloomustab olek $l=1$, $m=1$, kus m määrab impulssmomendi projektsiooni suunale Z . Leida võimalikud impulssmomendi projektsioonid suunale Z' , nende tõenäosused ja $M_{Z'}$, keskvärtus, kui Z' ja Z -vaheline nurk on α .

Märkus: Kuna $l=1$, siis m_1' võib olla $0, \pm 1$. Tuleneb leida arenduse $Y_{11}(\vartheta, \varphi) = \sum_{m_1'=-1}^1 C_{m_1'} Y_{1m_1'}(\vartheta', \varphi')$ kordajad. Funktsioonid $Y_{11}(\vartheta, \varphi)$ ja $Y_{1m_1'}(\vartheta', \varphi')$ on sobiv avaldada x, y, z ja x', y', z' kaudu vastavalt, pidades silmas sfääriliste ja Cartesiuse koordinaatide vahelist seost. Seejuures $x = x'$, $y = y' \cos \alpha - z' \sin \alpha$, $z = y' \sin \alpha + z' \cos \alpha$, $r = r'$.

Vastus:

$$W_0 = \frac{1}{2} \sin^2 \alpha, W_1 = \cos^4 \frac{\alpha}{2}, W_{-1} = \sin^4 \frac{\alpha}{2}; \\ M_{Z'} = \hbar \cos \alpha.$$

66. Leida tasapinnalise jäiga rotaatori (vt. ül. 42!) võimalikud energiläärtused, nende tõenäosused ja energia keskvärtus olekus, mida iseloomustab olekufunktsioon $\psi(\varphi) = A \cos^2 \varphi$, kus A on normeerimiskonstant.

Märkus: Arendada $\psi(\varphi)$ funktsioonide $\psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$ järgi, millele vastab energia $E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2I}$.

Vastus: $W|_{E_0} = \frac{2}{3}$, $W|_{E_1} = \frac{1}{3}$, $\bar{E} = \frac{2}{3} \frac{\hbar^2}{I}$.

67. Neutroni ja prootoni suhtelist potentsiaalset energiat kirjeldab funktsioon $U(r) = -A e^{-\frac{r}{a}}$. Leida põhis seisundi ($l=0$) olekufunktsioon ja seos potentsiaalaugu sügavuse A ja tuumatungide mõjuraadiust iseloomustava suuruse a vahel, kui deutroni põhioleku seosenergia $E = -2,2 \text{ MeV}$.

Märkus: Muutujate vahetusega $\xi = e^{-\frac{r}{2a}}$ ja asendusega $R(r) = r^{-\frac{1}{2}} \chi(\xi)$ taandada radiaalosa võrrand Besseli võrrandiks. Võrrandi lahendamiseks esitatud regulaarsuse nõue punktis $r=0$ annab

$$J_k(\kappa) = 0, \text{ kus } \kappa^2 = -\frac{8\mu}{\hbar^2} E a^2, \kappa e^2 = \frac{8\mu}{\hbar^2} A a^2.$$

Põhiolekule vastab selle võrrandi minimaalne juur, mis annabki seose a ja A vahel.

68. Leida elektroni impulsi tõenäosusejaotus vesiniku aatomi olekutes $1s$, $2s$ ja $2p$.

Märkus: Arendada energia normeeritud omafunktsioonid $\psi_{1,0,0}$, $\psi_{2,0,0}$ ja $\psi_{2,1,m}$ ($m=0, \pm 1$) impulssoperaatori omafunktsioonide järgi ja arvutada arenduse kordajate $\varphi(\vec{p})$ mooduli ruudud.

Vastus:
 $\varphi_{1s}(p) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{2a}{\hbar}\right)^{3/2} \left[1 + \frac{p^2 a^2}{\hbar^2}\right]^{-2};$

$$\varphi_{2s}(p) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{2a}{\hbar}\right)^{3/2} \left(\frac{p^2 a^2}{\hbar^2} - \frac{1}{4}\right) \left(\frac{p^2 a^2}{\hbar^2} + \frac{1}{4}\right)^{-2},$$

$$\psi_{2p}^{(0)}(r) = -\frac{i}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{a}{\hbar}\right)^{3/2} r_z a \left(\frac{r^2 a^2}{\hbar^2} + \frac{1}{4}\right)^{-3/2},$$

$$\psi_{2p}^{(\pm)}(r) = -\frac{i}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{a}{\hbar}\right)^{3/2} (r_x \pm i r_y) a \left(\frac{r^2 a^2}{\hbar^2} + \frac{1}{4}\right)^{-3/2}; a = \frac{\hbar^2}{4e^2}.$$

69. Osakese olekut läbipaistmatute seintega ühedimensioonaalses potentsiaalaugus kirjeldab funktsioon

$$\psi(x) = A x (a - x),$$

kus A on normeerimiskordaja, a - potentsiaalaugu laius. Leida osakese energia jaotus, keskvärtus ja ruutkeskmine fluktuatsioon mainitud olekus. (Vt. ül. 24!)

Märkus: Ülesanne lahendada ül. 66 eeskujul, kusjuures energia väärtused ja omafunktsioonid võtta ülesandest 24. Energia ruutkeskmiseks fluktuatsiooniks nimetatakse avaldist

$$(\Delta E)^2 = (E - \bar{E})^2.$$

Vastus:

$$W_n = \frac{240}{(\pi n)^6} [1 - (-1)^n]^2,$$

$$\bar{E} = \frac{\hbar^2 a^3}{6\mu} A^2, (\Delta E)^2 = 5 \frac{\hbar^4}{J^2}; A^2 = 30 a^{-5}.$$

70. Kuidas avaldub ajahetkel t jäiga tasapinnalise rotaatori olekufunktsioon, kui algmomendil $t=0$ oli rotaator olekus $\psi = A \sin^2 \varphi$, kus A on normeerimiskonstant?

Märkus: Ajast sõltuva Schrödingeri võrrandi üldlahend esitada Fourier' arendusena rotaatori statsionaarsetele olekutele vastavate funktsioonide järgi (ül.42). Rea kordajad leida algtingimusest.

Vastus:

$$\psi(\varphi, t) = \frac{A}{2} [1 - \cos 2\varphi \exp(-2i \frac{\hbar}{J} t)].$$

71. Milline olekufunktsioon kirjeldab hetkel t lineaarset harmoonilist ostsillaatorit, mis alghetkel $t=0$ oli olekus $\psi(x, 0)$, kus

$$\psi(x, 0) = C \exp\left[-\frac{1}{2} \lambda^2 (x-b)^2\right] ? \quad \lambda^2 = \frac{m\omega}{\hbar}, \quad b, c$$

- konstandid. Kontrollida määratuserelatsioonide kehtivust.

Märkus: Lineaarse harmoonilise ostsillaatori energia omafunktsioonid on antud ülesande 30 vastuses, Hermite'i polünoome sisaldavate integraalide arvutamist vt. lisa B!

Vastus:

$$\psi(x, t) = \frac{\lambda^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{\pi}^{\frac{1}{4}}} \exp\left\{-\frac{1}{2} (\xi - \xi_0 \cos \omega t)^2 - i\left(\frac{1}{2} \omega t + \xi \xi_0 \sin \omega t - \frac{1}{4} \xi_0 \sin 2\omega t\right)\right\},$$

kus $\begin{cases} \xi = \lambda x, \\ \xi_0 = \lambda b. \end{cases}$

72. Kasutades seost operaatorite vahel Heisenbergi ja Schrödingeri esituses (vt. lisa A!), leida operaator \hat{x} Heisenbergi esituses ühedimensionaalselt liikuva vaba osakese jaoks.

Märkus: Kuna vaba osakese Hamiltoni operaator avaldub ainult impulssoperaatori kaudu, on sobiv arvutada impulssesituses.

Vastus:

$$\hat{x}(t) = \hat{x} + t \frac{\hat{p}}{m}.$$

73. Leida lineaarse harmoonilise ostsillaatori koordinaadi ja impulsi avaldised Heisenbergi esituses.

Märkus: Kasutada operaatori ajalise tuletise avaldist

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}]. \quad \text{Paigutades } \hat{H} \text{ asemele ostsillaatori}$$

Hamiltoni operaatori, lahendada võrrand $\frac{d\hat{x}}{dt}$ ja $\frac{d\hat{p}}{dt}$ jaoks.

Vastus: $\hat{x}(t) = \hat{x} \cos \omega t + \frac{\hat{p}}{m\omega} \sin \omega t,$
 $\hat{p}(t) = \hat{p} \cos \omega t - m\omega \hat{x} \sin \omega t.$

74. Kasutades operaatori ajalise tuletise avaldist (vt. eelmise ülesande märkus!) näidata, et osakese koordinaatide keskvärtused rahuldavad Newtoni mehhaanika valemeid, s. t. $\frac{d^2}{dt^2} \overline{(\vec{r})} = \frac{1}{m} \overline{\vec{f}}$, kus $\vec{f} = -\text{grad } U.$

Märkus: Hamiltoni operaator võtta üldkujus: $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\vec{r})$

75. Näidata, et osakese impulsi keskvärtus $\overline{\vec{p}} = 0$, kui osake on diskreetsele energiaspektrile vastavas statsionaarses olekus.

Märkus: Kasutada seost $\overline{\vec{p}} = \frac{1}{m} \overline{\frac{d\vec{r}}{dt}}$, kommutaatorvalemit $\frac{d\vec{r}}{dt}$ määramiseks (ül. 73) ja operaatori \hat{H} hermiitilisust.

76. Lineaarset harmoonilist ostsillaatorit kirjeldab ajahetkel $t=0$ olekufunktsioon $\psi(x,0) = C e^{-\lambda^2 x^2} e^{i \frac{p_0}{\hbar} x}$, kus C on normeerimiskonstant, $\lambda^2 = \frac{m\omega}{\hbar}$, p_0 - konstant. Näidata, et p_0 on füüsikalise mõtte kohaselt impulsi keskvärtus olekus $\psi(x,0)$. Arvutada dispersioon $\overline{(\Delta x)^2}$ mistahes ajahetkel ja näidata, et harmoonilise ostsillaatori korral lainepakett ei haju, s. t. $\overline{(\Delta x)^2} \Big|_{t>0} = \overline{(\Delta x)^2} \Big|_{t=0}$.

Märkus: Funktsioon $\psi(x,t)$ leitakse sama meetodiga nagu ülesandes 71. p_0 tähenduse kontrollimiseks lähtuda vahetult \overline{p} definitsioonist.

77. Kasutades häiritusarvutust, leida anharmoonilise ost-

sillaatori energiatasemete nihe harmoonilise ostsillaatori vastavate tasemete suhtes, kui anharmoonilist ostsillaatorit iseloomustab potentsiaalne energia $U(x) =$

$$= \frac{m\omega^2}{2} x^2 + \varepsilon_1 x^3 + \varepsilon_2 x^4, \text{ kus } \varepsilon_1 \text{ on väike häiritus-}$$

parameeter, $\varepsilon_2 \sim \varepsilon_1^2$. Energiatasemed leida täpsuseni ε_1^2 .

Märkus: Harmoonilise ostsillaatori omafunktsioonide kohta vt. ül. 30 ja lisa B.

Vastus: $\Delta^{(1)} E_n = \frac{3}{4} \varepsilon_2 \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2 (2n^2 + 2n + 1),$

$$\Delta^{(2)} E_n = -\frac{\varepsilon_1^2}{8\hbar\omega} \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^3 (30n^2 + 30n + 11).$$

78. Kasutades häiritusarvutust, leida esimeses ja teises lähenduses tasapinnalise rotaatori energiatasemed nõrgas, rotatsioonitasapinnaga paralleelses elektriväljas $\vec{\mathcal{E}}$. Rotaatori mass on m , laeng e , rotatsiooni raadius a .

Märkus: Rotaatori omafunktsioonid on antud ülesande 42 vastuses. Valides rotatsioonitasendiks xy -tasandi, võime x -telje suunata mööda $\vec{\mathcal{E}}$. Siis häiritusenergia $H' = -ea\mathcal{E} \cos\varphi$.

Vastus: $\Delta_1 E_\mu = 0,$

$$\Delta_2 E_\mu = \frac{m e^2}{\hbar^2} a^4 \mathcal{E}^2 \frac{1}{4\mu^2 - 1}, \mu = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

79. Kuidas mõjustab vesiniku aatomi energiatasemeid elektroni massi relativistlik sõltuvus kiirusest? Leida vastavad energiaparandused järguni $\frac{v^2}{c^2}$.

Märkus: Häiritusenergia leidmiseks arendada relativistliku osakese Hamiltoni funktsioon $H = \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2} - m_0 c^2 + U(r)$ $\frac{1}{c^2}$ astmete järgi.

Siis annab erinevus vastavast mitterelativistliku osakese hamiltoniaanist häiritusliikme: $H' = -\frac{\hbar^4}{8m^3c^2}$. Energiaparanuse arvutamisel arvestada valemit:

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m} \right]^2 \psi_{n,\ell,m} = [E_n - U(r)]^2 \psi_{n,\ell,m}$$
 ja normeeritud funktsioonide $\psi_{n,\ell,m}$ kuju (vt. lisa B1).

Vastus:

$$\Delta_1 E = \left[\frac{3}{8n^4} - \frac{1}{(2\ell+1)n^3} \right] \frac{m e^4}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^2.$$

80. Arvutada tuuma lõplikest mõõtetest tingitud parandus vesinikusarnase aatomi energiatasemetele, kui oletada, et tuum on kera raadiusega a ja laenguga Ze , mis on jaotatud a) ühtlaselt kera pinnale, b) ühtlase ruumtihedusega.

Märkus: Häiritusena käsitleda lõplike mõõtetega tuuma potentsiaali ja kulonilise potentsiaali vahet korrutatud elektroni laenguga. Piirkonnas $r \leq a$ muutub elektroni olekufunktsiooni radiaalosa vähe, mistõttu võib kasutada tingimust $R_{n\ell}(r) \approx R_{n\ell}(0)$, kui $r \leq a$.

Vastus:

$$a) \Delta E_1 = -\frac{Ze^2}{6} a^2 R_{n\ell}^2(0);$$

$$b) \Delta E_1 = \frac{Ze^2}{10} a^2 R_{n\ell}^2(0).$$

81. Olgu osakese potentsiaalne energia n -astme homogeenne polünoom Cartesiuse koordinaatidest, s. t. $U(\lambda x, \lambda y, \lambda z) = \lambda^n U(x, y, z)$, kus λ on suvaline konstant. Tõestada viriaali teoreemi kehtivust, s. t. $2\overline{T} = n\overline{U}$, kus \overline{T} on kinetiline energia ja \overline{U} vastavalt potentsiaalse energia keskväär-tus diskreetse spektriga koguenergia omaolekus.

Märkus: Kasutada tingimust, et energia omafunktsioonid vastavad integraali $J = \int \psi^* H \psi dV = \int \psi^* (\hat{T} + U) \psi dV$ ekstreemumile. Kui $\psi(x, y, z)$ on energia omafunktsioon, siis võndlusfunktsioonide $\lambda^{3/2} \psi(\lambda x, \lambda y, \lambda z)$ abil moodustatud integraali $J(\lambda)$ ekstreemumitingimusest kohal $\lambda = 1$ järgneb otsitud seos.

82. Protoni ja neutroni vastastikust mõju kirjeldab potentsiaal $U(r) = -A e^{-\frac{r}{a}}$. Leida variatsioonimeetodil seotud süsteemi (deutroni) põhioleku ($l = 0$) energia ja olekufunktsioon.

Märkus: Schrödingeri võrrandis asendada nukleoni mass M taandatud massiga $\mu = \frac{1}{2} M$ ja valida normeeritud lähendusfunktsioonid kujus (oluline on ainult radiaalosa):

$$R(r) = \sqrt{\frac{\lambda^3}{8\pi a^3}} e^{-\frac{\lambda r}{2a}}.$$

Parameeter λ ja samuti energia väärtused leitakse integraali $J(\lambda) = \int \psi_\lambda^*(\vec{r}) \hat{H} \psi_\lambda(\vec{r}) dV$ ekstreemumitingimusest.

Vastus: $\frac{(\lambda + 1)^4}{\lambda} = \frac{12}{\hbar^2} A \mu a^2$. Valides eksperimendiga kooskõlas $a = 2,18 \cdot 10^{-13}$ cm, $A = 32,7$ MeV, $\frac{\hbar^2}{8\mu a^2} = 2,21$ MeV, $\lambda = 1,34$, $E = -2,18$ MeV.

83. Kasutades variatsioonimeetodit leida heeliumisarnase aatomi (järjenumber Z) põhioleku energia. Võrdlusfunktsioonideks valida vesinikusarnase aatomi olekufunktsioonide korrutis efektiivse järjenumbriga (variatsiooniparameetriga) λ .

Märkus: Integraal $J(\lambda)$ (vrd. ül. 10) moodustada tuuma Z väljas viibiva kahe elektroni hamiltoniaani ja olekufunktsioonide $\psi_\lambda(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\pi^3} \left(\frac{\lambda}{a}\right)^3 e^{-\frac{\lambda}{a}(r_1 + r_2)}$ abil (siin a on

Bohri raadius). Integreerida üle mõlema elektroni koordinaatide. Integraalis, mis sisaldab elektronide vastastikuse mõju liiget $\sim \frac{1}{r_{12}}$, kasutada arendust:

$$r_{12}^{-1} = \begin{cases} \frac{4\pi}{n_1} \sum_{\ell, m} \frac{1}{2\ell+1} \left(\frac{n_2}{n_1}\right)^\ell Y_{\ell m}^*(\alpha_1, \varphi_1) Y_{\ell m}(\alpha_2, \varphi_2), & n_1 > n_2, \\ \frac{4\pi}{n_2} \sum_{\ell, m} \frac{1}{2\ell+1} \left(\frac{n_1}{n_2}\right)^\ell Y_{\ell m}^*(\alpha_1, \varphi_1) Y_{\ell m}(\alpha_2, \varphi_2), & n_2 > n_1. \end{cases}$$

Seejuures osutuvad nullist erinevaiks vaid integraalid, kus $\ell = m = 0$.

Vastus:

$$\lambda = Z - \frac{5}{16}, \quad E = -\frac{\mu e^4}{\hbar^2} \left(Z - \frac{5}{16}\right)^2.$$

84. Leida esimene lähend energiale ja õige null-lähend olekufunktsioonile kahekordselt kõdunud energiatasemete puhul, kui häiritus on \mathcal{V} , häirimata süsteemi kaks sõltumatut omafunktsiooni on vastavalt ψ_1^0 ja ψ_2^0 .

Vastus:

$$E^{(1)} = \frac{1}{2} \left[(N_{11} + N_{22}) \pm \sqrt{(N_{11} - N_{22})^2 + 4 |N_{12}|^2} \right];$$

$$\psi^0 = C_1 \psi_1^0 + C_2 \psi_2^0;$$

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

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

$$N_{ik} = \int (\psi_i^0)^* \mathcal{V} \psi_k^0 (d\vec{r}).$$

85. Kasutades häiritusarvutuse esimest lähendust leida vesiniku aatomi energiatasemete lõhenemine nõrgas elektriväljas $\vec{\mathcal{E}}$ (lineaarne Starki efekt), kui aatom on esimeses ergutus-

olekus. Näidata, et põhitase samas lähenduses ei muutu.

Märkus: Elektrivälja \vec{E} suund valida polaartelje suunaks. Lahendada sekulaarvõrrand.

Vastus:

$$E^{(1)} = \pm 3ea\epsilon, 0, \text{ kus } a \text{ on Bohri raadius.}$$

86. Kasutades vesiniku aatomi energia omafunktsioone paraboolsetes koordinaatides (ülesanne 57), arvutada lineaarne Starki efekt n -nda energiataseme korral. Leida kaugus kahe äärmise komponendi vahel.

Märkus: Häiritusoperaatori paraboolsetes koordinaatides võib esitada kujus: $H' = \frac{1}{2}ea\epsilon(\xi - \eta)$. Matrikselementide arvutamist kõdunud hüpergeomeetriliste funktsioonidega vt. lisa B.

Vastus:

$$E^{(1)} = \frac{3}{2}n(n_1 - n_2)ea\epsilon,$$

$\Delta E = 3ea\epsilon n(n-1)$, kus ΔE on äärmiste komponentide vahe.

87. Linearsele harmoonilisele ostsillaatorile, mille laeng on e , mõjub x -telje suunaline elektrivälja tugevusega ϵ . Leida energiatasemete nihe häiritusteooria abil.

Märkus: Häirimata probleemi omafunktsioonid vt. ül. 30, matrikselementide arvutamine on esitatud lisa B.

Vastus: $E^{(2)} = -\frac{e\epsilon}{2m\omega^2}$.

88. Leida kvaasiklassikalises lähenduses homogeenses raskusväljas viibiva osakese energiatasemed, kui osakese liikumine on alt tõkestatud ideaalselt peegeldava pinnaga.

Märkus: Potentsiaalsel energial on kuju

$$U(z) = \begin{cases} +\infty, & z \leq 0, \\ mgz, & z > 0, \end{cases}$$

kus m on osakese mass, g - raskuskiirendus. Ideaalselt peegeldava pinna puhul on kvaasiklassikaline kvanttingimus:

$$\frac{1}{h} \int_a^b p dz = \left(n + \frac{3}{4}\right) \pi, \quad \text{kus } a=0, \quad b = \frac{E_n}{mg}, \quad p = \sqrt{2m(E_n - mgz)}.$$

Vastus:

$$E_n = \frac{1}{2} (9\pi^2 mg^2 h^2)^{\frac{1}{3}} \left(n + \frac{3}{4}\right)^{\frac{2}{3}}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

89. Leida tsentraalsümmeetrilises väljas viibiva osakese radiaalmuutujast sõltuv laine funktsioon kvaasiklassikalises lähenduses.

Märkus: Asendusega $R = r^{-1} \chi$ taandada radiaalosa võrrand ühedimensionaalse liikumise võrrandiks. χ otsida kujus

$\chi = A e^{i \frac{S}{h}}$, kus A ja S jaoks saadakse 2 võrrandit vastavalt reaali- ja imaginaarosale (funktsioonid A ja S on reaalsed).

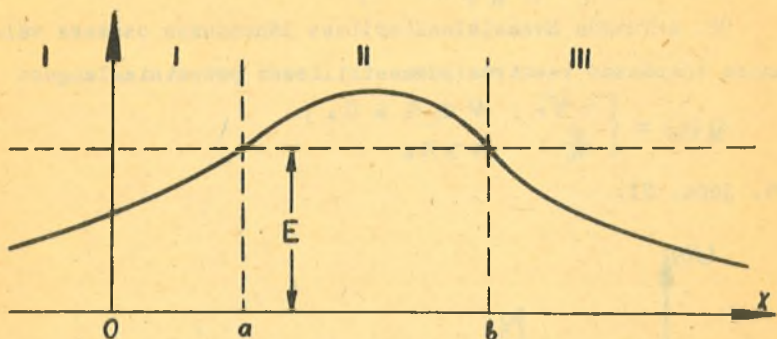
$$\text{Vastus: } A = C \left\{ 2m(E - U(r)) - \frac{\hbar^2 \left(l + \frac{1}{2}\right)^2}{r^2} \right\}^{-\frac{1}{4}},$$

$$S = \int \sqrt{2m(E - U(r)) - \frac{\hbar^2 \left(l + \frac{1}{2}\right)^2}{r^2}} dr; \quad R = \frac{A}{r} e^{i \frac{S}{h}}.$$

90. Leida potentsiaalbarjääri läbimise koefitsient D kvaasiklassikalises lähenduses, kui potentsiaalbarjääri kujutab joonis 6.

Märkus: Piirkonnas I võib kvaasiklassikalisele olekufunktsioonile anda kuju $\psi_I = \frac{2}{\sqrt{v}} \cos \left[\frac{1}{h} \int_a^x p dx + \frac{\pi}{4} \right]$, kui barjääri lugeda vähe läbilaskvaks (klassikaline barjäär on läbipaistmatu!)

$$\psi_{III} = -\frac{1}{N} \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} \left| \int_a^b p dx \right|\right\} \cdot \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_0^x p dx + \frac{i\pi}{4}\right\}.$$

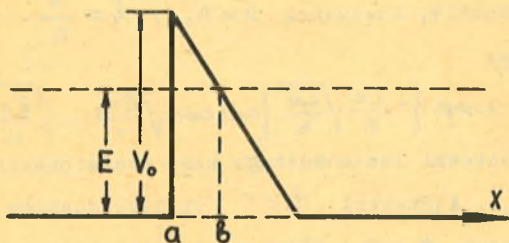


Joon. 6.

Vastus: $D = \exp\left\{-\frac{2}{\hbar} \left| \int_a^b p dx \right|\right\}.$

91. Kasutades eelmise ülesande tulemust, arvutada kvaa-
siklassikalises lähenduses elektronide väljumise koefitsient
metallist, kui metallplaat asetseb elektriväljas tugevusega
 \mathcal{E} .

Märkus: Vastav potentsiaalbarjäär on esitatud joonisel
7, s. t.



Joon. 7.

$$u(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0, \\ N_0 - \varepsilon x, & x > 0. \end{cases}$$

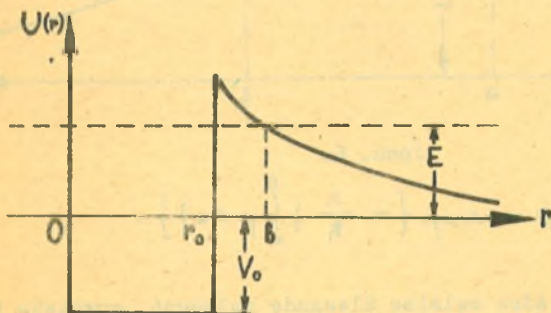
Vastus:

$$D \approx \exp \left\{ -\frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} |E|^{\frac{3}{2}} \right\}.$$

92. Arvutada kvaasiklassikalises lähenduses osakese väljumise tõenäosus tsentraalsümmeetrilisest potentsiaalaugust

$$u(r) = \begin{cases} -V_0, & 0 \leq r \leq r_0, \\ \frac{\alpha}{r}, & r > r_0. \end{cases}$$

(vt. joon. 8).



Joon. 8.

Märkus: Kuna tsentraalsümmeetriline juht on taandatav ühedimensionaalse liikumise juhule, on ülesandes 90 tuletatud valem kehtiv, kusjuures $a = r_0$, $b = \frac{\alpha}{E}$.

Vastus:

$$W \sim \exp \left\{ -\frac{2\alpha}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{\hbar}} \left[\arccos \sqrt{\frac{E r_0}{\alpha}} - \sqrt{\frac{E r_0}{\alpha} \left(1 - \frac{E r_0}{\alpha} \right)} \right] \right\}.$$

93. Süsteemi iseloomustagu kaks statsionaarset olekut

ψ_1 ja ψ_2 . Alghetkel $t = 0$ viibibu süsteem olekus ψ_1 .

Alates hetkest $t = 0$ mõjub süsteemile konstantne häiritus

∇ . Leida süsteemi olekufunktsioon $\psi(t)$.

Vastus:

$$\psi(t) = a_1(t)\psi_1 + a_2(t)\psi_2 \quad , \text{ kus}$$

$$a_1(t) = A (e^{-i\Omega_1 t} - e^{-i\Omega_2 t}) + e^{-i\Omega_2 t} ,$$

$$a_2(t) = B (e^{-i\Omega_1 t} - e^{-i\Omega_2 t}) e^{i(\omega_2 - \omega_1)t} ,$$

$$A = -\frac{\hbar\Omega_2 - N_{11}}{\hbar(\Omega_1 - \Omega_2)} , \quad B = \frac{N_{12}}{\hbar(\Omega_1 - \Omega_2)} ,$$

$$\hbar\Omega_{1,2} = N_{11} + \frac{\gamma}{2} \pm \sqrt{|N_{12}|^2 + \frac{\gamma^2}{4}} ,$$

$$\gamma = N_{22} - N_{11} + \hbar(\omega_2 - \omega_1) , \quad \omega_k = \frac{E_k}{\hbar} ;$$

$$N_{ik} = \int \psi_i^* \nabla \psi_k (d\vec{r}) ;$$

$$i, k = 1, 2 .$$

94. Kasutades eelmise ülesande tulemust näidata, et kahe statsionaarse olekuga süsteem hakkab konstantse häirituse mõjul perioodiliselt võnkuma olekute ψ_1 ja ψ_2 vahel sagedusega $\omega_0 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{|N_{12}|^2 + \frac{\gamma^2}{4}}$.

Märkus: Tõestuseks arvutada $|a_1|^2$ ja $|a_2|^2$ ja näidata, et nad sõltuvad perioodiliselt ajast t .

95. Linearsele harmoonilisele ostsillaatorile laenguga e mõjub ajas muutuv elektriväli $\mathcal{E}(t) = \frac{A}{\sqrt{\pi}\tau} \exp\left[-\left(\frac{t}{\tau}\right)^2\right]$, kus A, τ on konstandid. Leida ostsillaatori ergastumise töönaosus (ajahetkel $t \rightarrow \infty$), kui alghetkel ($t \rightarrow -\infty$) oli ostsillaator põhiolekus.

Märkus: Harmoonilise ostsillaatori omafunktsioonid on antud ülesandes 30. Maatrikselementide arvutamist vt. lisa B. Üleminekutõenäosuse arvutamisel kasutada valemit

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2 + i\beta x} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{-\frac{\beta^2}{4\alpha}}, \quad \alpha > 0.$$

Vastus: Üleminek võib toimuda ainult tasemesse $n=1$ tõenäosusega

$$W = \frac{e^2 A^2}{2m \hbar \omega} e^{-\frac{1}{2} (\omega \tau)^2}$$

96. Aatomiga seotud elektronile olekus ψ_0 langeb lineaarselt polariseeritud kiirgus, mille toimel aatom ergastub. Leida üleminekutõenäosus olekust ψ_0 olekusse ψ_n .

Märkus: Iseloomustagu kiirgust potentsiaal $A_x = A \cos \omega(t - \frac{z}{c})$, $A_y = A_z = 0$. Siis

$$H'_{n0} = i \frac{e \hbar}{2mc} \left\{ e^{-i\omega t} H_{n0}^{(1)} + e^{i\omega t} H_{n0}^{(2)} \right\}, \quad \text{kus}$$

$$H_{n0}^{(1)} = \int \psi_n^* e^{i\frac{\omega}{c} z} \frac{\partial \psi_0}{\partial x} (d\vec{r}), \quad H_{n0}^{(2)} = \int \psi_n^* e^{-i\frac{\omega}{c} z} \frac{\partial \psi_0}{\partial x} (d\vec{r}).$$

Üleminekutõenäosuse arvutamisel tuleb arvestada ainult liiget, mis vastab kiirguse neeldumisele (sisaldab ainult liiget $H_{n0}^{(1)}$). Lõppvalemis tuleb üle kõikide pealangevate lainete sageduste integreerida, kasutades valemit

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 \frac{1}{2} (\omega_0 - \omega_n + \omega) t}{(\omega_0 - \omega_n + \omega)^2} d\omega = \frac{\pi}{2} t.$$

Vastus:

$$W_{n0} = \left(\frac{e}{mc} \right)^2 \frac{\pi}{2} A^2 (\omega_{n0}) |H_{n0}^{(1)}(\omega_{n0})|^2 g(\omega_{n0}),$$

kus g on kiirguse spektraalne tihedus,

$\omega_{n0} = \omega_n - \omega_0$ on resonantsagedus.

97. Arvutada fotoemissiooni tõenäosus lineaarselt polariseeritud monokromaatse kiirguse toimel, kui elektroni lähteolekus kirjeldab funktsioon ψ_0 , lõppolekus - tasapinnaline laine $(2\pi)^{-\frac{3}{2}} e^{i\vec{k}\vec{r}}$.

Märkus: Kuna lõppolek kuulub pidevuse energiaspektrisse, tuleb üleminekutõenäosused korrutada energia (või sageduse) intervallile $dE_\nu = \hbar d\omega_\nu$ vastavate olekute arvuga. Valime lõppoleku lainefunktsiooni normeerituna kuubikujulises ruumalas serva pikkusega L , s. t. $\psi_\nu = L^{-\frac{3}{2}} e^{i\vec{k}_\nu\vec{r}}$. Siis on olekute arv intervalli $d\omega_\nu$ kohta

$$dZ_\nu = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \left(\frac{m}{\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{2\omega_\nu} d\omega_\nu d\Omega_\nu,$$

kus $d\Omega_\nu$ on ruuminurgaelement κ -ruumis. Kasutada ülesande 96 tähistusi ja δ -funktsiooni.

Vastus: Üleminekutõenäosus olekust ψ_0 olekusse ψ_ν energiaga $E_\nu = \hbar\omega_\nu = \frac{\hbar^2 k_\nu^2}{2m}$ ruuminurka $d\Omega_\nu$ võrdub

$$dW_{\nu_0} = A^2 \frac{\hbar}{2} \left(\frac{e}{mc}\right)^2 \frac{m}{\hbar} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 k_\nu |H_{\nu_0}^{(1)}(k_\nu)|^2 d\Omega_\nu.$$

98. Kasutades eelmise ülesande lahenduskäiku leida vesinikuaatomi ionisatsiooni tõenäosus ja ioniseerimiseks vajalik minimaalne sagedus, kui põhiolekus viibivale aatomile mõjub homogeenne, ajast perioodiliselt sõltuv elektriväli $\vec{\mathcal{E}}(t) = \vec{\mathcal{E}}_0 \sin \omega t$.

Märkus: Matrikselemendi arvutamisel valida väljapaiskunud elektroni lainevektori \vec{k} suund polaartelje suunas. Kui tähistada nurk \vec{k} , $\vec{\mathcal{E}}_0$ vahel θ , siis

$$\vec{\mathcal{E}}_0 \vec{r} = \mathcal{E}_0 r (\cos \theta \cos \varphi + \sin \theta \sin \varphi \cos \varphi),$$

kus ϑ , φ on tavalised nurgamuutujad antud sfäärilises koordinaadistikus.

Vastus:

$$d\omega_{\kappa_0} = \frac{64a^3}{\pi \hbar} \xi_0^2 \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^6 \left(\frac{\omega}{\omega_0} - 1\right)^{\frac{3}{2}} \cos^2 \theta d\Omega_{\kappa},$$

kus $\omega_0 = \frac{m e^4}{2 \hbar^3}$ on vesiniku aatomi põhioleku energiale vastav sagedus, a - Bohri raadius.

Ionisatsiooni kogu tõenäosus

$$W_i = \frac{256}{3} \frac{a^3}{\hbar} \xi_0^2 \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^6 \left(\frac{\omega}{\omega_0} - 1\right)^{\frac{3}{2}}.$$

$$\omega_{\min} = \frac{m e^4}{2 \hbar^3} = \omega_0.$$

99. Kasutades ülesande 97 vastuses antud valemit leida fotoemissiooni tõenäosus, kui aatomile langeb lineaarselt polariseeritud tasapinnaline laine ja elektroni algolekut kirjeldab kerassümmeetrilise ostsillaatori omafunktsioon, s. t.

$$\psi_0(z) = \left(\frac{\lambda}{\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{1}{2} \lambda^2 z^2}$$

(vt. ül. 53).

Märkus: Maatrikselementide arvutamisel kasutada Cartesiusse koordinaate.

Vastus:

$$d\omega_{\nu_0} = \left(\frac{eA}{mc}\right)^2 \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{m}{\hbar} \frac{1}{\lambda^3} K_{\nu} K_{\nu x}^2 \cdot$$

$$\cdot \exp \left\{ -\frac{4}{\lambda^2} \left[K_{\nu}^2 - 2 \frac{\omega}{c} K_{\nu z} + \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \right] \right\} d\Omega_{\kappa},$$

kus $K_x = K \sin \vartheta \cos \varphi$, $K_y = K \sin \vartheta \sin \varphi$, $K_z = K \cos \vartheta$.

Nurgad ϑ , φ määravad emiteeritud elektroni liikumise suuna. (Polaarteljeks on pealelangeva laine leviku suund).

100. Lineaarselt polariseeritud tasapinnaline laine langeb põhiolekus viibivale aatomielektronile. Leida elektroni

olekufunktsioon häiritusarvutuse esimeses lähenduses, kui elektroni põhiolekut iseloomustab funktsioon $\psi_0 e^{-i\omega_0 t}$ ja energia $E_0 = \hbar \omega_0$. Pealelangeva laine sagedus olgu ω .

Märkus: Valida koordinaadistik nii, et pealelangevat lainet iseloomustaks vektorpotentsiaal

$$A_x = A_0 \cos \omega \left(t - \frac{z}{c} \right), \quad A_y = A_z = 0.$$

Olekufunktsiooni otsida kujus $\psi = \psi_0 e^{-i\omega_0 t} + \psi_1(\vec{r}, t)$, kus ψ_1 on väike parandusliige võrreldes funktsiooniga ψ_0 .

Funktsioonile ψ_1 on sobiv anda järgmine kuju:

$$\psi_1(\vec{r}, t) = e A_0 \left\{ f(\vec{r}) e^{i(\omega - \omega_0)t} + g(\vec{r}) e^{-i(\omega + \omega_0)t} \right\},$$

kus funktsioonid $f(\vec{r})$, $g(\vec{r})$ võib arendada häirimata elektroni omafunktsioonide ψ_k järgi, mis moodustavad ON-süsteemi.

Vastus:

$$\psi = \psi_0 e^{-i\omega_0 t} + e A_0 i \frac{\hbar}{2m} \sum_k \left[\frac{a_{k_0}^- e^{i(\omega - \omega_0)t}}{\omega_0 - \omega_k - \omega} + \frac{a_{k_0}^+ e^{-i(\omega + \omega_0)t}}{\omega_0 - \omega_k + \omega} \right] \psi_k,$$

kus

$$a_{k_0}^{\pm} = \int \psi_k^* \frac{\partial \psi_0}{\partial x} e^{\pm i \frac{\omega}{c} z} dV.$$

101. Leida tasapinnalise, lineaarselt polariseeritud laine murdumisnäitaja üheaatomilises gaasis, mille optilisele elektronile mõjuvat välja võib lugeda tsentraalsümmeetriliseks. Pealelangeva laine pikkus olgu suur võrreldes aatomi mõõtmetega.

Märkus: Klassikalise optika põhjal on murdumisnäitaja n seotud aatomite arvuga N 1 cm^3 -s ja elektrilise polariseeritavusega α järgmise valemi abil:

$$n^2 - 1 = 4\pi N \alpha.$$

α leitakse aatomi dipoolmomendi \vec{d} avaldisest, võrreldes valemeid $\vec{d} = e \int \vec{r} \rho(\vec{r}) dV$, kus $e \rho(\vec{r})$ annab laengutiheduse, ja $\vec{d} = \alpha \vec{E}$, kus \vec{E} on elektrivälja tugevus. $\rho(\vec{r})$ arvutamisel kasutada eelmises ülesandes leitud avaldist lainefunktsiooni jaoks.

Vastus:

$$n^2 - 1 = \frac{4\pi N e^2}{m \omega} \sum_n \frac{a_{n0} f_{n0}}{\omega - (\omega_n - \omega_0)},$$

kus

$$a_{n0} = -\frac{4\pi}{3} \int_0^\infty R_n(r) \frac{d\psi_0(r)}{dr} r^2 dr,$$

$$f_{n0} = \frac{8\pi}{3} \int_0^\infty R_n(r) \psi_0(r) r^3 dr,$$

$\psi_0(r)$ on põhiolekule funktsioon, $\psi_n(\vec{r}) = R_n(r) Y_{lm}(r, \varphi)$, kui $n > 0$, ω on pealangeva laine sagedus, $\omega_n = \frac{E_n}{\hbar}$, $\omega_0 = \frac{E_0}{\hbar}$ - aatomi ergutatud ja põhiolekule vastavad sagedused.

102. Leida dipoolmomendi, impulsi ja x^2 matrikselemendid ühedimensionaalselt liikuva, vahemikku $-\frac{a}{2} \leq x \leq +\frac{a}{2}$ suletud osakese statsionaarsete olekute vahel.

Märkus: Omafunktsioonide leidmiseks vt. ül. 24.

Vastus:

$$|x_{nm}| = \frac{8a}{\pi^2} \frac{nm}{(n^2 - m^2)^2}, \text{ kui } n \text{ on paarisarv, } m \text{ paaritu või vastupidi;}$$

$$(x^2)_{nm} = \begin{cases} \frac{8a^2}{\pi^2} \frac{nm}{(n^2 - m^2)^2}, & \text{kui } n \text{ ja } m \text{ on paaris-} \\ & \text{arvud;} \\ \frac{4a^2}{\pi^2} \frac{n^2 + m^2}{(n^2 - m^2)^2}, & \text{kui } n \text{ ja } m \text{ on paari-} \\ & \text{tud;} \end{cases}$$

$$r_{nm} = \frac{\hbar}{ia} (-1)^{\frac{n+m+1}{2}} \frac{4nm}{n^2 - m^2}, \quad \text{kui } n \text{ on paaris, } m \text{ paaritu või vastupidi.}$$

103. Elektron asetseb tsendraalsümmeetrilises potentsiaalväljas $U(r)$. Leida valikureeglid dipoolkiirguse jaoks.

Märkus: Dipoolkiirguse tõenäosust iseloomustavad dipoolmomenti maatrikselemendid. Arvutamisel kasutada Legendre'i kaaspöönõomide jaoks antud valemeid lisas B.

Vastus:

$$\Delta l \equiv l' - l = \pm 1; \quad \Delta m \equiv m' - m = 0, \pm 1.$$

104. Kasutades üldist üleminekutõenäosuse valemit dipoolkiirguse jaoks mitterelativistlikus lähenduses,

$$W_{ab} = \frac{4}{3} \frac{e^2}{\hbar c} \frac{\omega^3}{c^2} |(\vec{r})_{ab}|^2,$$

leida tõenäosus optilise elektroni üleminekuks tasemelt (n, l) tasemele $(n', l \pm 1)$, kus n ja n' on vastavate tasemete peakvantarvud. (Eeldatud on, et optilisele elektronile mõjub aatomijäägi poolt tsendraalsümmeetriline väli).

Märkus: Tõenäosuse arvutamisel tuleb arvestada energiatasemete kõõdumist ja eelmises ülesandes leitud valikureegleid.

Vastus:

$$W_{NN'} = \frac{4}{3} \frac{e^2}{\hbar c} \frac{\omega^3}{c^2} |\vec{r}_{NN'}|^2,$$

$$|\vec{n}_{NN'}| = \sum_{m=-l}^l |(\vec{n})_{nlm, n'l'm'}|^2 = (l+1) |n_{nn'}|^2, \text{ kui } l \rightarrow l+1,$$

$$|\vec{n}_{NN'}| = \sum_{m=-l}^l |(\vec{n})_{nlm, n'l'm'}|^2 = l |n_{nn'}|^2, \text{ kui } l \rightarrow l-1,$$

$n_{nn'} = \int_0^\infty R_n(r) R_{n'}(r) r^3 dr$, kus $R_n(r)$ on lainefunktsiooni radiaalosa.

105. Leida vesinikuaatomi Balmeri seeria kahe esimese joone \mathcal{H}_α ja \mathcal{H}_β intensiivsuste suhe.

Märkus: Kasutada eelmise ülesande tulemusi ja arvutada $n_{nn'}$ radiaalosa olekufunktsioonide R_{20} , R_{21} , R_{30} , ..., R_{43} abil. Arvestada: kõdumist ka kvantarvu l suhtes. Laguerre'i polünoomide avaldised vt. lisa B.

Vastus:

$$\frac{J_\alpha}{J_\beta} = \frac{2^4 \cdot 3^{10}}{5^9} \cdot \frac{243}{209} \approx 2,18,$$

kus $J_\alpha = w_\alpha \cdot \hbar \omega_\alpha$ on \mathcal{H}_α - joone intensiivsus,

$J_\beta = w_\beta \cdot \hbar \omega_\beta$ on \mathcal{H}_β - joone intensiivsus,

$w_\alpha = \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^4 \frac{e}{a} \frac{2^8 \cdot 943}{5^{10}}$ on summaarne üleminekutõenäosus \mathcal{H}_α tekkimisel;

$w_\beta = \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^4 \frac{c}{a} \frac{2^6 \cdot 209}{3^{13}}$ - vastav tõenäosus \mathcal{H}_β korral,
 a - Bohri raadius.

106. Kontrollida seose $\frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle = \frac{1}{m} (\langle xp_x + p_x x \rangle)$ kehtivust ja arvutada $\frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle$ osakese jaoks, mille olekut intervallis $0 \leq x \leq a$ kirjeldab lainefunktsioon

$$\psi(x) = A \sin \frac{n\pi}{a} x.$$

Vastus:

$$\frac{d}{dt} (\bar{x}) = 0.$$

107. Kasutades üldistatud kiiruseoperaatori definitsiooni näidata, et kehtib seos $\left(\frac{dA}{dt}\right)_{mn} = i \omega_{mn} A_{mn}$ kus

$$A_{mn} = \int \psi_m^* \hat{A} \psi_n (d\vec{r}), \quad \omega_{mn} = \frac{1}{\hbar} (E_m - E_n),$$

ψ_n on Hamiltoni operaatori omafunktsioon.

108. Leida K -kihi elektroni sisekonversiooni koefitsient aatomis järjekorranumbriga Z , kui sisekonversioon toimub tuuma dipoolse ülemineku tõttu, mis on tingitud elektroni ja tuuma kuloniilisest interaktsioonist.

Märkus: Sisekonversiooni koefitsiendiks nimetatakse

järgmist suhet $\alpha = \frac{w_i}{w_i + w_k}$, kus w_i on tõenäosus, et paisatakse välja elektron, w_k - tõenäosus, et tuuma energia vabaneb elektromagnetilise kiirguse näol, kusjuures

$w_k = \frac{4}{3} \frac{\omega^3}{\hbar c^3} |(\vec{d})_{10}|^2$, (vt. ül. 104), kus $(\vec{d})_{10} = \int \psi_1^* \sum_k e \vec{r}_k \psi_0 d\tau$ on tuuma dipoolmomenti maatrikselement tuuma põhioleku ψ_0 ja ergutatud oleku ψ_1 vahel, (summeeritud on üle kõikide prootonite dipoolmomentide $e \vec{r}_k$, $d\tau$ on kõikide prootonite koordinaatide diferentsiaalide korrutis).

w_i arvutamisel peame silmas, et K -elektroni lähteolekut kirjeldab vesinikusarnase aatomi põhioleku funktsioon $\psi_0 = \frac{(Z/a)^{3/2}}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{Z}{a} r}$, lõppolekut - tasalaine $\psi_1 = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}}$. Häiritusenergiana võib vaadelda tuuma ja elektronide kuloni-

list energiat $H' = -\sum_r \frac{e^2}{|\vec{n} - \vec{n}_r|}$, kus \vec{n} on elektroni, \vec{n}_r - protonite kohavektorid. Kogu süsteemi algolekut kirjeldab seega funktsioon $\phi_0 = H_0 \psi_0$, lõppolekut $\phi_1 = H_1 \psi_1$. Häiritusmaatriksi arvutamisel on sobiv kasutada H' Fourier' arendust:

$$\sum_r \frac{1}{|\vec{n} - \vec{n}_r|} = \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{(d\vec{q})}{q^2} \sum_r e^{i\vec{q}(\vec{n} - \vec{n}_r)},$$

kusjuures $|\vec{q} \cdot \vec{n}_r| \ll 1$. Integreerimine $(d\vec{q})$ järgi jätta kõige lõpuks. W_i avaldise saamiseks tuleb integreerida üle väljapaisatud elektroni võimalikkude impulsside (vrd. ül.98):

Vastus:

$$\alpha = \frac{4 \left(\frac{Ze^2}{\hbar c}\right)^3 \frac{e^2}{\hbar v} \left(\frac{mc^2}{\hbar \omega}\right)^3}{1 + 4 \left(\frac{Ze^2}{\hbar c}\right)^3 \frac{e^2}{\hbar v} \left(\frac{mc^2}{\hbar \omega}\right)^3},$$

kus ω on kiirguse sagedus, $v = \frac{\hbar k}{m}$ - väljapaisatud elektroni kiirus.

109. Põhiolekus viibiv lineaarne harmooniline ostsillaator, mida iseloomustab elektrilaeng e , satub ajahetkel $t = 0$ tugevasse, edaspidi ajas konstantsesse elektrivälja \vec{E} . Leida n -nda energiataseme ergutamise sellise momentaanselt sisselülitatud häirituse mõjul.

Märkus: Kuna hetkel $t = 0$ omandab hamiltoniaan kuju $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$, kus $H_1 = -e \vec{E} x$, tuleb leida operaatori \hat{H} omafunktsioonid φ_n , $\varphi_n(x) = \psi_n(x - x_0)$, kus $x_0 = \frac{e E}{m \omega^2}$, ja arendada lähteoleku funktsioon ψ_0 nende järgi, (harmoonilise ostsillaatori omafunktsioonide kohta vt. ül. 30!):

$$\psi_0(x) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \varphi_n(x).$$

Vastus:

$$W_{n_0} = |c_n|^2 = \frac{(\lambda x_0)^{2n}}{2^n n!} e^{-\frac{1}{2} \lambda^2 x_0^2}, \quad \lambda^2 = \frac{m\omega}{\hbar}.$$

110. Raske osakese pörkumise tagajärjel aatomi tuumaga läheb aatom põhiolekust ψ_0 üle ergutatud olekusse ψ_n . Leida üleminekutõenäosus, kui tuum omandas pörke tagajärjel kiiruse \vec{v} , pörget aga võib lugeda momentaanseks.

Märkus: Kasutades momentaansealt "sisselülitatud" häirituse mõistet, tuleb põhioleku funktsioon ψ_0 arendada olekufunktsioonide ψ_n järgi, mis määravad aatomi statsionaarsed olekud kiirusega \vec{v} liikuva tuuma suhtes. Arenduseks on sobiv kasutada liikuva tuumaga seotud taustsüsteemi. Siis

$$\psi_n = \psi_n(\vec{n}_1, \dots, \vec{n}_N), \quad \psi_0 \rightarrow \psi_0', \quad \text{kus } \psi_0' = \\ = \psi_0(\vec{n}_1, \dots, \vec{n}_N) \exp\left\{-\frac{i m \vec{v}}{\hbar} \sum_{k=1}^N \vec{r}_k\right\}.$$

Vastus:

$$W_{n_0} = \left| \int \psi_n^* e^{i \vec{q} \cdot \sum_{k=1}^N \vec{r}_k} \psi_0(d\vec{r}_1) \dots (d\vec{r}_N) \right|^2, \quad \vec{q} = -\frac{m \vec{v}}{\hbar}.$$

111. Kasutades eelmise ülesande tulemusi leida vesiniku aatomi ergutuse ja ionisatsiooni summaarne tõenäosus, kui prooton pörkub raske osakesega.

Märkus: Summaarse ergutamise tõenäosus $w = 1 - w_0$, kus w_0 on põhiolekusse jäämise tõenäosus.

Vastus:

$$w = 1 - \left(1 + \frac{1}{4} q^2 a^2\right)^{-4}, \quad a - \text{Bohri raadius.}$$

112. Leida triteeriumi ergutuse ja ionisatsiooni summaarne tõenäosus β -lagunemisel, kui lagunemise akti lugeda praktiliselt momentaanseks.

Märkus: β -lagunemisel \mathcal{H}^3 muutub $\mathcal{H}e^3$ -ks, mistõttu elektroni potentsiaalne energia omandab väärtuse $U = -\frac{2e^2}{n}$. Seega tuleb vesiniku aatomi olekufunktsioon arendada vesinikusarnase aatomi $Z=2$ olekufunktsioonide järgi (vrd. eelmine ülesanne!).

Vastus:

$$w = 0,30.$$

113. Leida adiabaatse häiritusmeetodiga osakese ligikaudne olekufunktsioon hetkel t , $t > 0$, kui hamiltoniaan $H(t)$ on ajas aeglaselt muutuv suurus ning hetkel $t = 0$ viibis osake n -ndas kvantolekus. Millisel tingimusel on lähendusmeetod rakendatav?

Märkus: Otsitava funktsiooni arendusest

$$\psi(t) = \sum_k a_k(t) \varphi_k(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_k(t') dt'}$$

kus $\varphi_k(t)$ on nn. momentaanse hamiltoniaani omafunktsioonid ja $E_k(t)$ omaväärtused, tuletame diferentsiaalvõrrandid korrajatele $a_k(t)$ (vt. lisa A!). Võrrandite paremal poolel asendame $a_k \approx \delta_{kn}$. Lähendusmeetod on rakendatav, kui $|a_k(t)| \ll 1$, kui $k \neq n$.

Vastus:

$$a_k(t) = \frac{1}{\hbar} \int_0^t \frac{dt'}{\omega_{kn}} \left(\frac{\partial H}{\partial t'} \right)_{kn} \exp \left\{ \int_0^{t'} \omega_{kn}(t'') dt'' \right\}, k \neq n,$$

$$\omega_{kn}(t) = \frac{1}{\hbar} (E_k(t) - E_n(t)).$$

Saadud lähend on korrektne, kui $\left| \frac{\frac{\partial H}{\partial t} \frac{1}{\omega_{kn}}}{E_k - E_n} \right| \ll 1$.

114. Ajahetkel $t = 0$ on lineaarne harmooniline ostsillaator põhiolekus. Oletades, et ostsillaatori tasakaalupunkt

nihkub aeglaselt kiirusega v_0 , leida, missugustesse ergutatud olekutesse võib ostsillaator sattuda sellise liikumise tõttu, ja arutada üleminekutõenäosus ajahetkel $t > 0$.

Märkus: Ostsillaatori hamiltoniaan on:

$$\hat{H}(t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 [x - v_0 t]^2.$$

Vastavad momentaansed olekufunktsioonid saame näiteks ülesandest 30 asendusega $x \rightarrow x - v_0 t$. Omaväärtused ei muutu. Üleminekute arvutamiseks kasutada adiabaatset häiritusmeetodit (vt. lisa A!).

Vastus: Üleminek võib toimuda ainult olekusse $n = 1$,

$$w_{10}(t) = \frac{m v_0^2}{\hbar \omega} (1 - \cos \omega t).$$

115. Lõpmata kõrgete seintega ühedimensionaalses potentsiaalaugus viibiv osake on hetkel $t = 0$ n -ndas kvantolekus. Leida tõenäosus, et hetkeks $t > 0$ on osake sattunud k -ndasse kvantolekusse, kui ülemineku põhjuseks on potentsiaalaugu ühe seina adiabaatne nihkumine seaduse $x = a(t)$ kohaselt.

Märkus: Potentsiaalaugu seina iseloomustagu x väärtused $x_1 = 0$, $x_2 = a(t)$. Siis on momentaansete olekufunktsioonide kuju ja vastavad energiaväärtused leitavad ülesandest 24, kui asendada lihtsalt $a \rightarrow a(t)$. Selleks aga, et arutada adiabaatses häiritusteoorias esinevaid matrikselemente $\left(\frac{\partial H}{\partial t}\right)_{kn}$, leiame esialgu olekufunktsioonid osakese jaoks lõplike, kuigi küllalt kõrgete seintega potentsiaalaugus (vt. joon. 9). Siis

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial U_2}{\partial t},$$

kus

$$U_2(t) = \begin{cases} 0 & , \text{ kui } 0 < x < a(t), \\ U_0 & , \text{ kui } x \geq a(t). \end{cases}$$

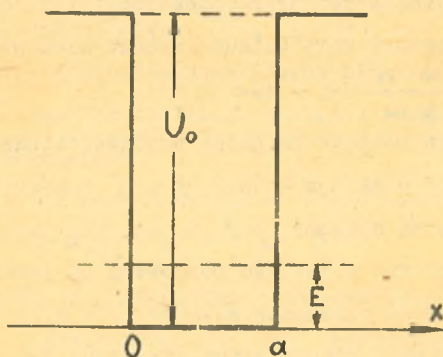
(U_2 on ainus ajast sõltuv suurus.)

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} = \frac{\partial u_2}{\partial a} \dot{a}, \text{ kus } \frac{\partial u_2}{\partial t} = -U_0 \delta(x-a(t)).$$

$$\left(\frac{\partial H}{\partial t}\right)_{\kappa n} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_0^{a+\varepsilon} \psi_{\kappa}^*(x) \frac{\partial u_2}{\partial t} \psi_n(x) dx,$$

kus

$$\psi_n(x) \approx \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \left[\frac{n\pi}{a} x - \left(2\frac{x}{a} - 1\right) \frac{n\pi}{a} \frac{\hbar}{\sqrt{2m U_0}} \right].$$



Joon. 9.

Vastus:

$$w_{\kappa n}(t) = \frac{4n^2\kappa^2}{(\kappa^2 - n^2)^2} \left| \int_0^t dt' \frac{\dot{a}}{a} \exp \left[i \frac{\pi^2 \hbar}{2m} (\kappa^2 - n^2) \int_0^{t'} \frac{dt''}{a^2} \right] \right|^2.$$

116. Osake massiga μ , laenguga l ja spiniga null liigub homogeenses magnetväljas $\vec{\mathcal{H}}$. Leida niisugused stationaarsed olekud, kus impulssmomendi projektsioon välja suunale on kindla väärtusega.

Märkus: Avaldada vektorpotentsiaal vektori $\vec{\mathcal{H}} = (0, 0, \mathcal{H})$ kaudu, $\vec{A} = \frac{1}{2} [\vec{\mathcal{H}} \times \vec{r}]$ ning esitada magnetväljas viibiva osa-

kese hamiltoniaan (vt. lisa A!) silindrilistes koordinaatides ρ, z, φ . Siis $A_\rho = A_z = 0, A_\varphi = \frac{1}{2} \mathcal{H} \rho$. Energia omafunktsioonis $\psi(\vec{r})$ on siis muutujad eraldatavad:

$$\psi(\vec{r}) = e^{im\varphi + i \frac{p_z z}{\hbar}} f(\rho).$$

$f(\rho)$ leitakse polünoommeetodil.

Vastus:

$$E = \frac{\hbar^2}{2\mu} + \hbar \omega \left(r + \frac{1}{2} \right), \quad \omega = \frac{e \mathcal{H}}{\mu c},$$

$$\psi_{n,m,p_z}(\rho, \varphi, z) = C \exp \left[im\varphi + \frac{i}{\hbar} p_z z - \frac{\rho^2}{4a^2} \right].$$

$$\cdot \left(\frac{\rho}{a} \right)^{|m|} F(-n, |m|+1, \frac{\rho^2}{2a^2}),$$

kus $a^2 = \frac{\hbar c}{e \mathcal{H}}$; $2r = 2n + m + |m|$; $n = 0, 1, 2, \dots$;

$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

117. Leida kiiruse komponentide v_x, v_y, v_z operaatorid magnetväljas liikuva laetud osekeste jaoks ja nende vahelised kommutatsioonieskirjad.

Märkus: Kasutada kiiruse operaatori definitsioonivalemit $\hat{B} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{B}]$ ja magnetväljas liikuva osakese hamiltoniaani kujul $\hat{H} = \frac{(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A})^2}{2m}$, kus e on osakese laeng, m - mass, \vec{A} - elektromagnetvälja vektorpotentsiaal.

Vastus: $\hat{v} = \frac{1}{m} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right),$

$$[\hat{v}_i, \hat{v}_k] = \frac{ie\hbar}{m^2 c} \epsilon_{ikl} \mathcal{H}_l, \text{ kus } \mathcal{H}_l = (\text{rot } \vec{A})_l; \epsilon_{ikl}$$

on täielikult antisümmeetriline ühiktensor, mille kirjeldus on antud ülesandes 5.

118. Kuidas mõjustab homogeenne magnetväli \vec{H} aatomi-elektroni energiatasemeid? Oletades, et statsionaarseid olekuid kirjeldavad funktsioonid $\psi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r) P_l^{|m|}(\cos\vartheta) e^{im\varphi}$, lahendada ülesanne häiritusmeetodil (normaalne Zeemani efekt).

Märkus: Kasutada seost $\vec{A} = \frac{1}{2} [\vec{H} \times \vec{r}]$ ja suunata polaartelg Z paralleelselt vektoriga \vec{H} . Häiritusenergia avaldise teisendamisel pidada silmas operaatori \hat{M}_z kuju Cartesiuse koordinaatides.

Vastus:

$$|\Delta E| = \frac{e\hbar}{2\mu c} H_m, \text{ kus } \mu \text{ on elektroni mass.}$$

119. Kasutades ülesande 117 tulemusi leida laetud osakese energiaspekter homogeeneses magnetväljas tugevusega \vec{H} .

Märkus: Valides Z -telje paralleelselt vektoriga \vec{H} , on võimalik Hamiltoni operaator lahutada kaheks osaks:

$$\hat{H}_1 = \frac{\mu(\hat{v}_x^2 + \hat{v}_y^2)}{2}, \quad \hat{H}_2 = \frac{\mu\hat{v}_z^2}{2},$$

kusjuures \hat{H}_1 ja \hat{H}_2 kommuteeruvad. \hat{v}_x ja \hat{v}_y rahuldavad konstandi täpsuseni samu kommutatsioonieskirju nagu koordinaat ja vastav kanooniline impulss. Seetõttu on \hat{H}_1 omaväärtusprobleem analoogiline lineaarse harmoonilise ostsillaatori omaväärtusprobleemiga (vrd. eelmise tsükli ül. 23).

Vastus:

$$E_{n_1, n_2} = \frac{e\hbar}{\mu c} H \left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{\mu v_z^2}{2},$$

$n = 0, 1, 2, \dots;$ v_z on suvaline.

120. Leida laetud osakese energia omafunktsioonid homo-

geenses elektri- ja magnetväljas, mille tugevuse vektorid \vec{E} ja \vec{H} on teineteisega risti.

Märkus: z -telg suunata paralleelselt vektoriga \vec{H} , x -telg vastavalt vektoriga \vec{E} , siis vektorpotentsiaali komponendid on: $A_x = A_z = 0$; $A_y = \mathcal{H}x$ Hamiltoni operaator on lahutatav jälle kaheks osaks (vt. ül. 119!), millest ühel on ostsillaatori hamiltoniaani omadused, teine osa kommuteerub esimesega.

Vastus:

$$E_{n, p_y, p_z} = \hbar \frac{e\mathcal{H}}{\mu c} \left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{p_z^2}{2\mu} - \frac{p_y c \mathcal{E}}{\mathcal{H}} - \frac{\mu c^2 \mathcal{E}^2}{2\mathcal{H}^2};$$

$$\Psi_{n, p_y, p_z}(x, y, z) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(p_y y + p_z z) - \frac{e\mathcal{H}}{2\hbar c} \left(x - \frac{c p_y}{e\mathcal{H}} - \frac{m c^2 \mathcal{E}^2}{e\mathcal{H}^2}\right)^2\right\} \mathcal{H}_n \left[\frac{\sqrt{e\mathcal{H}}}{c\hbar} \left(x - \frac{c p_y}{e\mathcal{H}} - \frac{m c^2 \mathcal{E}^2}{e\mathcal{H}^2}\right) \right].$$

\mathcal{H}_n on Hermite'i polünoom.

121. Laetud osake viibib homogeenses magnetväljas ja tsentraalsümmeetrilises potentsiaaliväljas $U(r) = \frac{1}{2} m \omega_0^2 r^2$. Määrata osakese energiatasemed!

Märkus: z -telg suunata paralleelselt magnetväljaga \vec{H} ja kasutada silindrilisi koordinaate. Siis laguneb hamiltoniaan kaheks osaks, millest üks vastab tasapinnalisele harmoonilisele ostsillaatorile sagedusega $\sqrt{\omega_0^2 + \left(\frac{e\mathcal{H}}{2\mu c}\right)^2}$, teine z -telje sihis võnkuvale lineaarsele ostsillaatorile sagedusega ω_0 .

Vastus:

$$E_{n_1, n_2, m} = \hbar \sqrt{\omega^2 + \omega_0^2} (2n_1 + |m| + 1) + \hbar \omega m + \hbar \omega_0 (n_2 + \frac{1}{2}),$$

kus

$$\omega = \frac{e \hbar \mathcal{H}}{2\mu c}; \quad n_1, n_2 = 0, 1, 2, \dots; \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

122. Kasutades ülesande 118 vastust, leida homogeenses magnetväljas liikuva laetud osakese voolutiheduse vektor, kui osake on olekus, mida iseloomustavad kvantarvud $n, m, \mu_z = \hbar k$.

Märkus: Avaldada operaator ∇ silindrilistes koordinaatides (vt. lisa A1).

Vastus:

$$j_\varphi = 0, \quad j_z = \frac{e \hbar k}{\mu} |\psi_{n, m, \mu_z}|^2,$$

$$j_r = \left(\frac{e \hbar m}{\mu \varrho} - \frac{e^2 \hbar}{2\mu c} \varrho \right) |\psi_{n, m, \mu_z}|^2.$$

123. Määrata kvaasiklassikalises lähenduses osakese energiatasemed ja klassikalisele osakesele lubatud liikumiskiir-
kond radiaalsihis (kasutada silindrilisi koordinaate!), kui osake viibib homogeenses magnetväljas.

Märkus: Ülesandes 118 saadud radiaalosa võrrand taandada asendusega $\phi(\varrho) = \varrho^{-\frac{1}{2}} \chi(\varrho)$ ühedimensionaalse liikumise võrrandiks. Seejärel kasutada Bohri kvanttingimust.

Vastus: Energia väärtus on sama mis ülesande 116 vastuses, liikumisrajad määratakse tingimusest

$$\varrho_{1,2} = \sqrt{\frac{2\hbar c}{e \mathcal{H}}} \left(\sqrt{n + m + \frac{1}{2}} \pm \sqrt{n + \frac{1}{2}} \right).$$

124. Leida radiaalsuunalise koordinaadi määramatus laetud osakese korral homogeenses magnetväljas, mis on võetud

paralleelseks silindri teljega.

Märkus: Ülesande 116 lahendist radiaalosa jaoks on leitav piirkond, kus $|\psi|^2$ on oluliselt nullist erinev.

Vastus:

$$\Delta \varphi \sim \sqrt{\frac{\hbar c}{2\beta\epsilon}}.$$

125. Leida ajast sõltuvad koordinaatoperaatorid $\hat{x}(t)$, $\hat{y}(t)$ laetud osakese jaoks, mis liigub xy -tasandiga risti olevas homogeenses magnetväljas.

Märkus: Lähtuda liikumisvõrranditest $\hat{x} + i\hat{y}$ ja $\hat{p}_x + i\hat{p}_y$ jaoks $\left(\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}]\right)$ ja need lahendada, võttes algtingimuseks Heisenbergi esituse operaatori võrdsuse Schrödingeri esituse vastava operaatoriga.

Vastus: $\omega = \frac{e\hbar}{\mu c};$

$$\begin{aligned} \hat{x}(t) &= \left(\frac{i\hbar}{\mu\omega} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{x}{2}\right) \cos \omega t + \\ &+ \left(-\frac{i\hbar}{\mu\omega} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{y}{2}\right) \sin \omega t + \left(-\frac{i\hbar}{\mu\omega} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{x}{2}\right); \\ \hat{y}(t) &= \left(-\frac{i\hbar}{\mu\omega} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{x}{2}\right) \sin \omega t + \\ &+ \left(-\frac{i\hbar}{\mu\omega} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{y}{2}\right) \cos \omega t + \left(-\frac{i\hbar}{\mu\omega} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{y}{2}\right). \end{aligned}$$

126. Lahendada Schrödingeri võrrand vaba osakese jaoks sfäärilistes koordinaatides ja arendada tasalainekujuline lahend saadud erilahendite järgi.

Märkus: Asendusega $R(r) = r^{-\frac{1}{2}} \chi(r)$ taandada radiaalosa võrrand Besseli võrrandiks. Kui polaartelg valida paralleelselt tasalaine levikuvektoriga, kehtib järgmine arendus:

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \vartheta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} c_{\ell} \sqrt{\frac{\pi}{2k\ell}} J_{\ell+\frac{1}{2}}(kr) P_{\ell}(\cos \vartheta).$$

Koefitsientide C_ℓ arvutamiseks on sobiv vaadelda juhtu, kui $r \rightarrow \infty$ (vt. lisa B!).

Vastus:

$$e^{ikr} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^\ell \sqrt{\frac{\pi}{2k\ell}} Y_{\ell+\frac{1}{2}}(ka) P_\ell(\cos\vartheta).$$

127. Langevu neutronite voog raskele tuumale raadiusega Potentsiaali käiku võib siis ligikaudu kirjeldada valemiga

$$U(r) = \begin{cases} +\infty, & \text{kui } r \leq a, \\ 0, & \text{kui } r > a. \end{cases}$$

Leida hajutatud neutronite intensiivsuse jaotus ja hajutamise totaalne ristlõige, kui $\lambda \gg a$, kus λ on neutronite de Broglie lainepikkus.

Märkus: Piirkonnas $r > a$ võib Schrödingeri võrrandi lahendi ψ koostada erilahenditest

$$u_{\ell,m}(r,\vartheta) = \sqrt{\frac{\pi}{2k\ell}} Z_{\ell+\frac{1}{2}}(kr) P_\ell^{(m)}(\cos\vartheta) e^{im\varphi}, \quad (1)$$

kus $Z_{\ell+\frac{1}{2}}$ on mõnesugune silindriline funktsioon. Otsitav lahend ψ peab rahuldama ääretingimusi: 1) $\psi = 0$, kui $r = a$, 2) $\psi \rightarrow e^{ikr} + f(r) \frac{e^{ikr}}{r}$, kui $r \rightarrow \infty$.

Silmas pidades Hankeli funktsioonide asümptootilist kuju (vt. lisa B), võib $f(r) \frac{e^{ikr}}{r}$ avaldada järgmiselt:

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} C_\ell e^{i2\pi} (2\ell+1) \sqrt{\frac{\pi}{2k\ell}} \mathcal{H}_{\ell+\frac{1}{2}}^{(1)}(ka) P_\ell(\cos\vartheta).$$

Kordajad C_ℓ määratakse esimesest ääretingimusest. Tingimusel $ka \ll 1$ võime piirduda funktsioonide $Y_{\ell+\frac{1}{2}}(ka)$ ning $\mathcal{H}_{\ell+\frac{1}{2}}^{(1)}(ka)$ rea esimeste liikmetega. Saadud C_ℓ kujust järgneb siis, et $f(r) \frac{e^{ikr}}{r}$ arenduses partsiaallainete jär-

gi võib piirduda ainult liikmetega $l=0$.

Vastus:

$$\begin{aligned} \psi(r) &= -a && (\text{piirdudes liikmetega } l=0), \\ \sigma &= 4\pi a^2. \end{aligned}$$

128. Lahendada eelmisega analoogiline ülesanne, kui potentsiaalil tuuma sees on lõplik väärtus, s. t.

$$U(r) = \begin{cases} V_0 & , \text{ kui } r \leq a, \\ 0 & , \text{ kui } r > a. \end{cases}$$

Ülesanne lahendada juhul, kui $V_0 > E$ ja juhul, kui $V_0 < E$, kus E on pealelangevate neutronite energia.

Märkus: Kui $V_0 > E$, avaldub sisepiirkonna ($r < a$) lahend Besseli funktsioonide kaudu imaginaarsest argumentist, s. o.

$$\psi_{\text{sis}} = \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} \sum_l i^l (2l+1) \alpha_l I_{l+\frac{1}{2}}(kr) P_l(\cos\vartheta). \quad (1)$$

Välispiirkonna lahend koosneb pealelangevast tasalainest ja hajuvast sfäärilisest lainest ning on esitatav kujus

$$\psi_{\text{väl}} = \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} \sum_l i^l (2l+1) [\beta_l Y_{l+\frac{1}{2}}(kr) + \beta_l \mathcal{H}_{l+\frac{1}{2}}^{(1)}(kr)] P_l(\cos\vartheta). \quad (2)$$

Koefitsiendid α_l ja β_l leitakse pidevusetingimustest punktis $r=a$. Siin on kasutatud tähistusi:

$$\alpha_l^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E); \quad \kappa^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}.$$

Tingimusel $\kappa a \ll 1$ võib piirduda hajutamisamplituudi arvutamisel liikmega $l=0$.

Kui $V_0 < E$, siis $\alpha_l^2 < 0$ ja $\mathcal{K} = i\alpha$ on reaalarv.

Vastus:

$$\sigma_0 = 4\pi a^2 \left(\frac{\text{th } \kappa a}{\kappa a} - 1 \right)^2, \text{ kui } \sqrt{V_0} > E, \ell = 0;$$

$$\sigma_0 = 4\pi a^2 \left(\frac{\text{tg } \kappa a}{\kappa a} - 1 \right)^2, \text{ kui } \sqrt{V_0} < E.$$

129. Kasutades partsiaallainete meetodit, arvutada hajumisfaasid δ_ℓ osakese jaoks, mis hajub tõuketungide potentsiaalil

$$U(r) = \frac{\alpha}{r^2}, \alpha > 0.$$

Märkus: Taandada eelmise ülesande eeskujul radiaalosa võrrand Besseli võrrandiks ja leida lahendi asümptootiline kuju (regulaarsuse nõudest koordinaatide alguspunktis tuleb arvesse ainult I liiki Besseli funktsioon).

Vastus:

$$\delta_\ell = -\frac{\pi}{2} \left\{ \sqrt{\left(\ell + \frac{1}{2}\right)^2 + \lambda} - \left(\ell + \frac{1}{2}\right) \right\} < 0,$$

$$\lambda = \frac{2m}{\hbar} \alpha > 0.$$

130. Arvutada osakeste hajutamise efektiivne ristlõige, kui osakesed langevad kerasümmeetrilisele potentsiaalaugule sügavusega $-\sqrt{V_0}$ ja raadiusega a . Osakeste de Broglie lainepikkus $\lambda \gg a$.

Märkus: Lahenduskäik on analoogiline ülesandes 128 esitatuga. Piirduda juhuga $\ell = 0$.

Vastus:

$$\sigma = 4\pi \frac{(1 - \kappa a \text{ ctg } \kappa a)^2}{\kappa^2 \text{ ctg}^2 \kappa a + \kappa^2},$$

kus

$$\kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E + \sqrt{V_0}), \quad \kappa^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}.$$

131. Uurida osakeste resonantshajumist kerasümmeetrilisel potentsiaalaugul (vt. ülesanne 130!), kui osakeste energia rahuldab tingimust: $E \ll \mathcal{V}_0$. Leida efektiivse ristlõike avaldis, kui pealelangevate osakeste energia on samas suurusjärgus, märksa suurem või märksa väiksem resonantstaseme energiast $-\mathcal{E}$ ($\mathcal{E} > 0$).

Märkus: Kerasümmeetrilises potentsiaalaugus viibiva osakese energiatasemed, kui $\ell = 0$, on arvutatud ülesandes 47. Juhul $E \ll \mathcal{V}_0$ võib resonants esineda vaid siis, kui ka

$\mathcal{E} \ll \mathcal{V}_0$. Siis

$$\kappa a \operatorname{ctg} \kappa a \ll 1; \quad \kappa a \approx \sqrt{\frac{2m\mathcal{V}_0 a^2}{\hbar^2}} \approx (2n+1)\frac{\pi}{2}.$$

Ülesande 130 vastuses võib nimetajas asendada $\kappa^2 \operatorname{ctg}^2 \kappa a \approx -\frac{2m\mathcal{E}}{\hbar^2}$.

Vastus:

$\sigma \approx \frac{2\pi\hbar^2}{m} \frac{1}{E+\mathcal{E}}$, kui E ja \mathcal{E} on samas suurusjärgus;

$\sigma \approx 4\pi\lambda^2 \gg 4\pi a^2$, kus $\lambda = \frac{\hbar}{\sqrt{2mE}}$, kui $E \gg \mathcal{E}$;

$\sigma \approx \frac{2\pi\hbar^2}{m\mathcal{E}} = \text{konst.} \gg 4\pi a^2$, kui $E \ll \mathcal{E}$.

132. Arvutada aeglaste osakeste hajumise efektiivne ristlõige, kui hajutav tsentraalsümmeetriline potentsiaal on järgmine:

$U(r) = U_0 e^{-\frac{r}{a}}$, kus U_0 ja a on positiivsed konstandid.

Märkus: Aeglaste osakeste korral $\kappa a \ll 1$, kus $\kappa = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, E on pealelangevate osakeste energia. Radiaalosa võrrand taandada asendusega $R(r) = r^{-1} Z(r)$ ühedimensionaalse liikumise võrrandiks, mis uue sõltumatu muutuja valikuga, $y = e^{-\frac{r}{2a}}$,

taandub Besseli võrrandiks (kõikjal võtta $l = 0$).

Lahendit tuleb otsida regulaarsena punktis $n = 0$ ($y = 1$) ja koosnevana tasalaine ning sfääriliselt hajuva laine summast asümptootilisel piirjuhul $n \rightarrow \infty$ ($y \rightarrow 0$). Besseli funktsioonide kohta vt. lisa B.

Vastus: $\sigma = 4\pi f^2$, kus $f = -2a \left[C + \ln \frac{\lambda}{2} + \frac{Y_0(\lambda)}{I_0(\lambda)} \right]$,

C on Euleri konstant, $\lambda^2 = \frac{\delta^m}{\hbar^2} U_0 a^2$.

133. Lahendada eelmisega analoogiline ülesanne, kui osakesed hajuvad tõmbetungide potentsiaalil, s. t., kui $U(r) = -U_0 e^{-\frac{r}{a}}$, $U_0, a > 0$.

Märkus: Formaaalselt võib kasutada eelmise ülesande lahenduskäiku, asendades $i\lambda \rightarrow \lambda$. Eraldi tuleb uurida juhtu, kus λ erineb tunduvalt $J_0(\lambda)$ juurtest, ja juhtu, kus $J_0(\lambda) \rightarrow 0$ (resonants).

Vastus:

$$f \approx -2a \frac{(C + \ln \frac{\lambda}{2}) J_0(\lambda) - \frac{\pi}{2} N_0(\lambda)}{J_0(\lambda) - i\pi \frac{\pi}{2} N_0(\lambda)}, \quad p = \sqrt{\frac{8mEa^2}{\hbar^2}};$$

üldjuhul;

$$f \approx -2a \left[C + \ln \frac{\lambda}{2} - \frac{\pi}{2} \frac{N_0(\lambda)}{J_0(\lambda)} \right], \quad \text{kui } \lambda \text{ on erinev}$$

$$f \approx 2a \left[\frac{2}{\pi} \frac{J_0(\lambda)}{N_0(\lambda)} - \right. \quad \left. J_0 \text{ nullkohtadest;} \right.$$

$$\left. - i\pi \right]^{-1}, \quad \text{kui } |J_0(\lambda)| \ll 1 \text{ (resonants).}$$

134. Leida osakese diskreetsed energiatasemed tõmbetungide väljas, $U(r) = -U_0 e^{-\frac{r}{a}}$, kui $l = 0$, ja näidata, et leitud energilaväärtused on avaldise $e^{2i\delta_0}$ nullkohtadeks.

δ on S - laine hajumisfaas.

Märkus: Omaväärtusprobleemi võrrandi lahendamise kohta vt. ül. 132 ja 133. Hajumisfaas δ_0 leitakse funktsiooni χ (tähistus vt. ül. 132!) asümptootilisest kujust $\chi \sim \sin(kr + \delta_0)$.

Vastus:

$$e^{2i\delta_0} = \frac{J_{i2ak}(2ax) \Gamma(i2ak+1)}{J_{-i2ak}(2ax) \Gamma(-i2ak+1)} \exp[-i4ak \ln(ax)],$$

$$E_n = -\frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \cdot k_n \text{ määratakse tingimusest}$$

$$J_{2ak_n}(2ax) = 0, \quad x = \frac{2m}{\hbar^2} U_0.$$

135. Leida elastse hajumise efektiivne ristlõige Borni lähendusmeetodiga, kui hajutav potentsiaal on: $U(r) = A \frac{e^{-\alpha r}}{r}$, kus $A, \alpha > 0$. Analüüsida piirjuhte $k \ll \alpha$ (aeglased osakesed) ja $k \gg \alpha$ (kiired osakesed), $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$. Anda lähendi kehtivuse kriteerium.

Märkus: Borni lähenduses avaldub hajumisamplituud f

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(\vec{r}') e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}'} (d\vec{r}').$$

Integreerimisel kasutada sfäärilisi koordinaate, suunates polaartelje piki vektorit $\vec{k}-\vec{k}'$. Lähendi kehtivuse kriteerium on teise liikme väiksus lainefunktsiooni avaldises $\psi = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + \psi^{(1)}$, s. t. $|\psi^{(1)}(\vec{r})|^2 \ll 1$.

Kuna suurte n väärtuste korral $\psi^{(1)} \sim \frac{e^{ikr}}{r}$, piisab, kui vaadelda tingimust $|\psi^{(1)}| \ll 1$. Analüüsida tuleb eraldi juhul $k \gg \alpha$ ja $k \lesssim \alpha$.

Vastus:

$$d\sigma = \left(\frac{2Am}{\hbar^2}\right)^2 \frac{d\Omega}{(\alpha^2 + q^2)^2}, \quad \text{kus } q = 2k \sin \frac{\vartheta}{2},$$

on hajumisnurk;

$d\sigma = \left(\frac{Am}{\hbar^2 \kappa^2}\right)^2 d\Omega$, kui $\kappa \ll \kappa_0$ ja lähendusmeetod on õige, kui $\frac{|A|m}{\kappa \hbar^2} \ll 1$;

$d\sigma = \left(\frac{A}{4E}\right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\chi}{2}}$, kui $\kappa \gg \kappa_0$ ja hajumisnurgad on suured, s. t. $q \gg \kappa_0$. Lahend kehtib, kui $\frac{|A|}{\hbar v} \ll 1$, kus $v = \frac{\hbar \kappa}{m}$ on osakese kiirus.

136. Kasutades Borni lähendusmeetodit hajumisamplituudi f arvutamiseks (vt. eelmine ülesanne), näidata, et osakese hajumine δ -kujulisel potentsiaalil $U(r) = B \delta(\vec{r})$, kus B on konstant, on isotroopne ega sõltu osakese kiirusest. Arvutada integraalne ristlõige.

Vastus:

$$\sigma = 4\pi \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2 B^2}{\pi \hbar^4}.$$

137. Arvutada hajumise efektiivne ristlõige Borni lähenduses, kui hajutav potentsiaal on

$$U(r) = \begin{cases} -U_0 & , \text{ kui } r \leq a, \\ 0 & , \text{ kui } r > a. \end{cases}$$

Leida lähendusmeetodi kehtivuse kriteerium.

Märkus: Ülesanne lahendatakse 135 eeskujul.

Vastus:

$$d\sigma = \frac{4m^2 U_0^2 a^2}{\hbar^4} \frac{(\sin qa - qa \cos qa)^2}{(qa)^6} d\Omega,$$

kus

$$qa = 2ka \sin \frac{\chi}{2}.$$

Aeglaste osakeste korral, s. t. $\kappa a \ll 1$, kehtib meetod, kui

$$\frac{m}{\hbar^2} U_0 a^2 \ll 1.$$

Kiirete osakeste korral, $\kappa a \gg 1$, peab olema rahuldatud

tingimus $\frac{U_0 a}{\hbar v} \ll 1$.

138. Leida hajumise efektiivne ristlõige Borni meetodil, kui hajutav potentsiaal on:

$$a) U(r) = U_0 e^{-\alpha^2 r^2},$$

$$b) U(r) = U_0 e^{-\alpha r}.$$

Vastus:

$$a) d\sigma = \frac{\pi m^2 U_0}{4 \hbar^4 \alpha^6} \exp\left[-\frac{4mE}{\hbar^2 \alpha^2} \sin^2 \frac{\vartheta}{2}\right] d\Omega;$$

$$b) d\sigma = \frac{16 m^2 U_0}{\hbar^4} \frac{\alpha^2}{(\alpha^2 + q^2)^4} d\Omega; \quad q = 2k \sin \frac{\vartheta}{2}.$$

139. Leida kiirets elektronide hajumise efektiivne ristlõige Borni meetodil, kui elektronid hajuvad vesiniku aatomitel.

Märkus: Kui elektron hajub aatomil järjekorranumbriga

Z , siis hajutaval potentsiaalil on kuju

$$U(\vec{r}) = -e^2 \left(\frac{Z}{r} - \sum_{n=1}^Z \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_n|} \right) |\psi_0(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_Z)|^2 (d\vec{r}_1) \dots (d\vec{r}_Z),$$

kus ψ_0 on aatomi põhioleku olekufunktsioon, \vec{r}_n - n -nda aatomielektрони raadiusvektor. Vesiniku aatomi korral $\psi_0 = (\pi a^3)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{r}{a}}$, kus a on Bohri raadius.

Vastus:

$$d\sigma = \frac{4 a^2 (8 + q^2 a^2)^2}{(4 + q^2 a^2)^4} d\Omega, \quad q = 2k \sin \frac{\vartheta}{2}.$$

140. Arvutada Borni lähenduses elektronide hajumise efektiivne ristlõige, kui elektronid hajuvad ühtlase ruumlaenguga tuumal, mille kogulaeng on Ze ja raadius R .

Märkus: Funktsioon $U(\vec{r})$ arvutatakse valemist

$U(\vec{r}) = -e \varphi(\vec{r})$, kus $\varphi(\vec{r})$ on võrrandi

$\Delta \varphi = -4\pi q$ lahendiks. Antud juhul

$$\varphi(r) = \begin{cases} q_0, & \text{kui } r \leq R, \\ 0, & \text{kui } r > R. \end{cases}$$

Vastus:

$$d\sigma = \frac{36m^2}{h^4} \frac{z^2 z^4 (\sin qR - qR \cos qR)^2}{q^2 (qR)^6} d\Omega; \quad q = 2k \sin \frac{\alpha}{2}.$$

141. Näidata, et Rutherfordi valem, $d\sigma = \left(\frac{\alpha}{4E}\right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\alpha}{2}}$

kulonilises väljas $U(r) = \frac{\alpha}{r}$ hajuvate osakeste efektiivse ristlõike jaoks on arvutatav Borni lähendusmeetodiga ja ka täpselt, kui olekufunktsiooni leidmiseks kasutada parabolseid koordinaate ξ, η, φ (vt. ül. 57!).

Märkus: Kuna hajumispilt on telgsümmeetriline, võib olekufunktsiooni otsida kujus $\psi(\xi, \eta) = f_1(\xi) f_2(\eta)$, kuna sõltuvus nurgast φ ei tule arvesse (vastavalt kvantarv $m=0$). Funktsioonide f_1 ja f_2 leidmisel tuleb silmas pida nn. tasalaine tingimust:

$\psi \sim e^{ikz}$ kui $-\infty < z < 0$, $z \rightarrow \infty$ (osakese liikumissuund on valitud z -telje suunaks). Parabolsetes koordinaatides $\psi \sim e^{i\frac{kz}{2}(\xi-\eta)}$, kui $\eta \rightarrow \infty$, ξ on suvaline.

Seda tingimust on võimalik rahuldada vaid siis, kui $f_1(\xi) = e^{i\frac{kz}{2}\xi}$, $f_2(\eta) = e^{-i\frac{kz}{2}\eta} w(\eta)$, kus $w(\eta)$ leitakse vastavast võrrandist ja avaldub kõdunud hüpergeomeetrilise funktsiooni kaudu. Hajumisamplituudi leidmiseks tuleb vaadelda asümptootilist avaldist ($\eta \rightarrow \infty$) (vt. lisa B!)

ja üle minna sfäärilistele koordinaatidele. Arvutus annab:

$$f(\nu) = -\frac{\alpha}{2k^2 \sin^2 \frac{\nu}{2}} \exp\left[-\frac{2i}{k} \ln\left(\sin \frac{\nu}{2}\right)\right] \frac{\Gamma\left(1 + \frac{i}{k}\right)}{\Gamma\left(1 - \frac{i}{k}\right)}.$$

142. Näidata, et üldjuhul, nii elastse kui ka mitte-elastse hajumise puhul kehtib järgmine seos totaalse efektiivse ristlõike σ ($\sigma = \sigma_{el} + \sigma_{inel}$) ja elastselt otsette hajunud ($\nu = 0$) osakeste amplituudi $f(\nu)$ vahel:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(0) \quad (\text{nn. optiline teoreem}).$$

Märkus: Kasutada σ_{el} , σ_{inel} ja $f(\nu)$ arendust partiaallainete järgi (vt. lisa A1).

143. Leida kiirete neutronite hajumise ja neeldumise efektiivsed ristlõiked nn. "musta" tuuma piirjuhul, s. t. kõigi tuumale sattunud neutronite neeldumisel.

Märkus: Küllalt kiirete neutronite korral võib lugeda rahuldatuks tingimust $l \gg \lambda$, kus R on tuuma raadius, λ - neutronite de Broglie laine pikkus. Kasutades poolklassikalist analüüsi, võib neutronite impulssmomenti tuuma keskpunkti suhtes hinnata suurusjärgult võrdseks $\sim \hbar l$, kusjuures tuuma sattuvad neutronid, mille impulssmoment ei ületa suurust $\hbar k R$, s. t. $l \lesssim \frac{R}{\lambda}$. Seda võrratust rahuldavate l väärtuste korral hajumisfaasid $\delta_l = 1$. Kui $l > \frac{R}{\lambda}$, siis $\delta_l = 0$.

Vastus:

$$\sigma_{el} = \sigma_{inel} = \pi \lambda^2 \sum_{l=0}^{R/\lambda} (2l+1) \approx \pi R^2.$$

144. Kirjeldagu elektroni olekut spinfunktsioon

$$\chi = \begin{pmatrix} e^{i\alpha} \cos \delta \\ e^{i\beta} \sin \delta \end{pmatrix},$$

kus α, β, δ on meelevaldsed konstandid. Näidata, et tõenäosus leida spini projektsiooni väärtusi $+\frac{\hbar}{2}$ (või $-\frac{\hbar}{2}$) etteantud Z -teljele on vastavalt $\cos^2 \delta$ (või $\sin^2 \delta$). Milline on tõenäosus leida spini projektsiooni $\pm \frac{\hbar}{2}$ mõnesugusele suunale Z' , mis moodustab antud Z -telje suunaga nurga ϑ ?

Märkus: Spiniori avaldist võib vaadelda kui reaksarendust spinoperaatori \hat{S}_2 omafunktsioonide $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ja $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ järgi esituses, kus \hat{S}_2 on diagonaalne (nn. S_z -esituses). Selleks, et leida spini projektsiooni tõenäosust suunale Z' , tuleb määrata funktsiooni χ kuju uues koordinaadistikus, mille Z' -telg moodustab esialgse Z -teljega nurga ϑ . (Spiniori teisenemiseeskirju vt. lisa B1).

Vastus:

$$W_{+\frac{1}{2}} = \cos^2 \frac{\vartheta}{2} \cos^2 \delta + \sin^2 \frac{\vartheta}{2} \sin^2 \delta + \frac{1}{2} \sin \vartheta \sin(\alpha - \beta) \sin 2\delta,$$

$$W_{-\frac{1}{2}} = \cos^2 \frac{\vartheta}{2} \sin^2 \delta + \sin^2 \frac{\vartheta}{2} \cos^2 \delta - \frac{1}{2} \sin \vartheta \sin(\alpha - \beta) \sin 2\delta.$$

145. Spinfunktsioon S_z -esituses on

$$\chi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\alpha} \cos \delta \\ e^{i\beta} \sin \delta \end{pmatrix}.$$

Leida niisuguse ruumisuuena sfäärilised koordinaadid ϑ, φ , millele spini projektsioon antud olekus on kindla väärtusega $\frac{\hbar}{2}$.

Märkus: Kasutades spiniori teisenemiseeskirju (lisa B), määrata nurkadega (ϑ, φ) (defineeritud suund Z' tingimusest $\psi_2' = 0$).

Vastus:

$$\vartheta = 2\delta, \quad \varphi = \frac{\pi}{2} + \beta - \alpha$$

146. Kasutades spiniori teisenemiseeskirju näidata, et koordinaadistiku pöörämisel nurga φ võrra ümber telje, mida iseloomustavad sihikoosinused α , β , γ , teiseneb spinfunktsioon järgmise eeskirja kohaselt: $\chi' = S \chi$,

$$S = \cos \frac{\varphi}{2} + i (\alpha \sigma_1 + \beta \sigma_2 + \gamma \sigma_3) \sin \frac{\varphi}{2},$$

kus σ_1 , σ_2 , σ_3 on Pauli spinmaatriksid.

147. Leida operaatori $\alpha \hat{S}_x + \beta \hat{S}_y + \gamma \hat{S}_z$, ($\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 = 1$), omafunktsioonid ja näidata, et mistahes spiniori χ arenduse kordajad nende funktsioonide järgi määravad tõenäosuse, et mõõtes spini projektsiooni suunale, mille sihikoosinusteks on α , β , γ , saame väärtuseks $+\frac{\hbar}{2}$ või $-\frac{\hbar}{2}$.

Märkus: Omaväärtusprobleemi võrrand on järgmine:

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \gamma & \alpha - i\beta \\ \alpha + i\beta & -\gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = C \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}.$$

Vastus:

$$\psi_{+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2(1-\gamma)}} \begin{pmatrix} \alpha - i\beta \\ 1-\gamma \\ 1 \end{pmatrix}; \quad \psi_{-\frac{1}{2}} = -\frac{1}{\sqrt{2(1+\gamma)}} \begin{pmatrix} \alpha - i\beta \\ 1+\gamma \\ 1 \end{pmatrix}.$$

148. Leida elektroni spinoperaatorite \hat{S}_x , \hat{S}_y , \hat{S}_z kuju S_x -esituses (s. t. esituses, kus \hat{S}_x on diagonaalne) ja määrata unitaarne maatriks, mis vastab üleminekule S_z -esitusest S_x -esitusse.

Märkus: Pauli maatriksid S_x -esituses (σ_x' , σ_y' , σ_z') leitakse indeksite (x , y , z) tsüklilise ümbertahistamisega: $z \rightarrow x$, $x \rightarrow y$, $y \rightarrow z$. Unitaarne operaator U , mis sellele teisendusele vastab, leitakse maatriksvõrranditest

$\sigma_x' = U^{-1} \sigma_x U$; $\sigma_y' = U^{-1} \sigma_y U$; $\sigma_z' = U^{-1} \sigma_z U$,
 kus U on teist järku maatriks.

Vastus:

$$\sigma_x' = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; \sigma_y' = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \sigma_z' = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ 1 & i \end{pmatrix}.$$

149. Leida elektroni spini projektsioonide \hat{S}_x , \hat{S}_y omaväärtused ja omafunktsioonid S_2 -esituses.

Vastus:

$$\chi_{S_x = \frac{\hbar}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}; \chi_{S_x = -\frac{\hbar}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix};$$

$$\chi_{S_y = \frac{\hbar}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}; \chi_{S_y = -\frac{\hbar}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}.$$

150. Arvutada operaatori $(\vec{A} \cdot \vec{S})^2$ omaväärtused, kui \vec{A} on harilik, operaatoriga \vec{S} kommuteeruv vektor.

Vastus:

$$(\vec{A} \cdot \vec{S})^2 \Big|_{\text{omav.}} = \frac{\hbar^2}{4} A^2.$$

151. Teisenegu olekufunktsioon ψ koordinaadistiku pöör-
 ramisel nurga θ võrra ümber telje, mida iseloomustab ühik-
 vektor \vec{n} järgmise eeskirja kohaselt:

$$\psi' = \mathcal{D} \psi, \text{ kus } \mathcal{D} = \exp \left[-i \theta \frac{\hat{J}_{\vec{n}}}{\hbar} \right]$$

ja \hat{J}_1 , \hat{J}_2 , \hat{J}_3 tähistavad pöörde infinitesimaalseid
 operaatoreid. Näidata, et operaatorid \hat{J}_κ ($\kappa = 1, 2, 3$) ra-
 huldatavad kommutatsioonieskirju

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_k] = i\hbar \varepsilon_{ikl} \hat{J}_l \quad (\text{vrd. ül. 4 ja 5!}).$$

Märkus: Kommutatsioonieeskirjad järgnevad pöörete rühme omadusest: kaks järjestikku rakendatud pööret on ekvivalent-
sed kolmandaga, s. t.

$$\mathcal{D}(\vec{n}) = \mathcal{D}(\vec{n}_2) \mathcal{D}(\vec{n}_1) \quad (1) \text{ ja } \mathcal{D}(\vec{n}') = \mathcal{D}(\vec{n}_1) \mathcal{D}(\vec{n}_2), \quad (2)$$

kus $\mathcal{D}(\vec{n}) \neq \mathcal{D}(\vec{n}')$ üldjuhul. Kui vaadelda infinitesimaal-
seid pööreid nurga $\delta\theta$ võrra, võib kirjutada

$$\mathcal{D}(\vec{n}) = \left[1 - \frac{i}{\hbar} \delta\theta (\hat{J} \vec{n}) \right] \quad (3). \text{ Kasutades tähistusi:}$$

$$\delta\theta_1 \vec{n}_1 = \delta\theta_1 (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3); \quad \delta\theta_2 \vec{n}_2 = \delta\theta_2 (\beta_1, \beta_2, \beta_3);$$

$$\delta\theta \vec{n} = \delta\theta (\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3); \quad \delta\theta' \vec{n}' = \delta\theta' (\gamma'_1, \gamma'_2, \gamma'_3)$$

võime avaldada $\delta\theta \vec{n}$ ja $\delta\theta' \vec{n}'$ $\delta\theta_1 \vec{n}_1$ ja $\delta\theta_2 \vec{n}_2$
kaudu:

$$\gamma_i = \alpha_k \beta_l, \quad (i, k, l = (1, 2, 3) \text{ tsükkel}),$$

$$\delta\theta = \delta\theta_1 \delta\theta_2 = \delta\theta'; \quad (4) \quad \gamma'_i = \beta_k \alpha_l, \quad (i, k, l = (1, 2, 3) \text{ tsükkel}). \quad (5)$$

Valemitest (1), (2) ja (3) järeldub infinitesimaalsete pööre-
te korral: $\mathcal{D}(\vec{n}) - \mathcal{D}(\vec{n}') =$

$$= -\frac{i}{\hbar} \left\{ \delta\theta (\hat{J}_k \gamma_k) - \delta\theta' (\hat{J}_k \gamma'_k) \right\} = \frac{1}{\hbar^2} \delta\theta_1 \delta\theta_2 \beta_k \alpha_l [\hat{J}_k, \hat{J}_l]; \quad (6)$$

Pidades silmas avaldisi (4), (5), saame võrdusest (6) sõltu-
matute parameetrite $\delta\theta_1 \delta\theta_2 \beta_k \alpha_l$ koefitsientide võrdlemise
teel otsitavad kommutatsioonieeskirjad.

152. Kasutades ülendas 151 tuletatud kommutatsiooni-
eeskirju, veenduda järgmiste seoste kehtivuses:

$$\left. \begin{aligned} \hat{J}_3 \hat{J}_+ \psi &= \hbar(\beta+1) \hat{J}_+ \psi, \\ \hat{J}_3 \hat{J}_- \psi &= \hbar(\beta-1) \hat{J}_- \psi, \end{aligned} \right\} (1), \text{ kui } \hat{J}_3 \psi = \hbar\beta \psi,$$

kus $\hat{J}_+ = \hat{J}_1 + i \hat{J}_2$, $\hat{J}_- = \hat{J}_1 - i \hat{J}_2$.

Kasutades seoseid (1) ning operaatori $\hat{J}^2 = \sum_{k=1}^3 \hat{J}_k^2$ kommuteeruvust \hat{J}_k -dega, näidata, et 1) \hat{J}_3 omaväärtused $\hbar\beta$ on järgmised: $-\frac{n\hbar}{2}, -\frac{n\hbar}{2} + \hbar, \dots, +\frac{n\hbar}{2}$; 2) \hat{J}^2 omaväärtused on $\hbar^2 \alpha$ (s. t. $\hat{J}^2 \psi = \hbar^2 \alpha \psi$), kus $\alpha = \frac{\hbar}{2} \left(\frac{n}{2} + 1 \right)$, n on mõnesugune naturaalarv.

Märkus: Seostest (1) järgneb: $\hat{J}_- \psi(\beta_{\min}) = 0$ ning samuti $\hat{J}_+ \hat{J}_- \psi(\beta_{\min}) = 0$. Avaldades $\hat{J}_+ \hat{J}_-$ operaatorite \hat{J}^2 ja \hat{J}_3 kaudu ning pidades silmas ψ kui omafunktsiooni tähendust, saame $\beta_{\min} \cdot (\beta_{\min} - 1) = \alpha$. Analoogiliselt seosest $\hat{J}_+ \psi(\beta_{\max}) = 0$ ja $\hat{J}_- \hat{J}_+ \psi(\beta_{\max}) = 0$ järgneb $\beta_{\max}(\beta_{\max} + 1) = \alpha$, millest $\beta_{\max} = -\beta_{\min}$ ja $\beta_{\max} - \beta_{\min} = n$, kuna $\psi(\beta_{\max})$ saadakse $\psi(\beta_{\min})$ -st operaatori \hat{J}_+ n -kordsel rakendamisel.

153. Tuletada \hat{J}_1 , \hat{J}_2 , \hat{J}_3 maatrikskuju \hat{J}_3 esituses, kui \hat{J}^2 omaväärtused on määratud avaldisega $\hbar^2 j(j+1)$, kus $j = \frac{n}{2}$ (vt. eelmine ülesanne!).

Märkus: Eelmise ülesande seostest (1) järgneb, et

$$\hat{J}_+ \psi(\beta) = C_\beta \psi(\beta+1),$$

$$\hat{J}_- \psi(\rho) = \bar{c}_\rho \psi(\rho-1),$$

millest

$$(\hat{J}_1)_{ik} = \frac{1}{2} \{ c_{\beta_k} \delta_{i, k+1} + \bar{c}_{\beta_k} \delta_{i, k-1} \},$$

$$(\hat{J}_2)_{ik} = \frac{i}{2} [-c_{\beta_k} \delta_{i, k+1} + \bar{c}_{\beta_k} \delta_{i, k-1}],$$

$$(\hat{J}_3)_{ik} = \hbar \beta_k \delta_{ik};$$

$$\beta_k = -j, -j+1, \dots, +j.$$

Operaatorite \hat{J}_1, \hat{J}_2 hermitilisuse tõttu

$$\bar{c}_{\beta_{k+1}} = c_{\beta_k}^*;$$

$$(\hat{J}_+ \hat{J}_-)_{ik} = |c_{\beta_{k-1}}|^2 \delta_{ik}.$$

Teiselt poolt aga $(\hat{J}_+ \hat{J}_-)_{ik} = (\hat{J}^2 + \hbar \hat{J}_3 - \hat{J}_3^2)_{ik}.$

Viimaste valemite võrdlus annabki otsitavad koefitsiendid.

Vastus:

$$c_{\beta_{k-1}} = \hbar \sqrt{(j + \beta_k)(j - \beta_k + 1)}.$$

154. Leida osakese jaoks spiniga 1 operaatorid \hat{S}_x , \hat{S}_y , \hat{S}_z ja \hat{S}^2 S_z -esituses ning operaatorite \hat{S}_x ja \hat{S}^2 ühised ortonormeeritud omafunktsioonid.

Märkus: Kasutades ülesandes 152 tuletatud kuju meelevaldse j korral ning võtta $j=1$. Omaväärtusprobleem taandub maatriksvõrrandi $\hat{S}_z \psi = \hbar m_s \psi$ lahendamisele.

Vastus:

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

$\hat{S}^2 = 2I$ kus I on kolmandat järku ühikmaatriks.

$$\psi_{+1} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \psi_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \psi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

155. Leida spinfunktsiooni teisenemise eeskiri koordinaatistiku meelevaldse pöörde korral, kui osakese spin on 1.

Märkus: Kuna mistahes pööre on kirjeldatav kolme järjestikku rakendatud pöörde resultaadina - pööre ümber z -telje nurga ψ võrra, ümber x -telje nurga φ võrra ja ümber z -telje nurga ψ võrra - , saadakse meelevaldse pöörde maatriks kolmele mainitud pöördele vastavate maatriksite korutisena:

$$D = D(\varphi) D(\psi) D(\psi).$$

Maatriksid $D(\psi)$ ja $D(\varphi)$ on hõlpsasti leitavad ülesannetest 151 ja 154, näiteks

$$D(\psi) = \begin{pmatrix} e^{i\psi} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\psi} \end{pmatrix}.$$

$D(\varphi)$ leidmiseks on sobiv lähtuda infinitesimaalsest teisen-
dusest

$$\begin{pmatrix} \psi_1' \\ \psi_2' \\ \psi_3' \end{pmatrix} = \left(1 + \frac{i}{\hbar} \hat{S}_x d\varphi\right) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \end{pmatrix}$$

, kus \hat{S}_x on antud ülesandes 154.

Kuna $\psi' = \psi(d\psi) = \psi + \frac{d\psi}{d\psi} d\psi$, saame järgmise diferentsiaalvõrrandite süsteemi $\frac{d\psi_1}{d\psi} = \frac{i}{\sqrt{2}} \psi_2$; $\frac{d\psi_2}{d\psi} = \frac{i}{2} (\psi_1 + \psi_3)$; $\frac{d\psi_3}{d\psi} = \frac{i}{\sqrt{2}} \psi_2$,

millest $\psi(\psi) \equiv \psi'$ avaldub $\psi|_{\psi=0} \equiv \psi$ kaudu järgmise maatriksi abil: $\psi' = D\psi$,

$$D(\psi) = \begin{pmatrix} \cos^2 \frac{\psi}{2} & \frac{i}{\sqrt{2}} \sin \psi & -\sin^2 \frac{\psi}{2} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} \sin \psi & \cos \psi & \frac{i}{\sqrt{2}} \sin \psi \\ -\sin^2 \frac{\psi}{2} & \frac{i}{\sqrt{2}} \sin \psi & \cos^2 \frac{\psi}{2} \end{pmatrix}.$$

Vastus:

$$D(\psi, \psi, \varphi) = \begin{pmatrix} \cos^2 \frac{\psi}{2} e^{i(\psi+\varphi)} & \frac{i}{\sqrt{2}} e^{i\varphi} \sin \psi & -e^{-i(\psi+\varphi)} \sin^2 \frac{\psi}{2} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} e^{i\varphi} \sin \psi & \cos \psi & \frac{i}{\sqrt{2}} e^{-i\varphi} \sin \psi \\ -e^{i(\psi-\varphi)} \sin^2 \frac{\psi}{2} & \frac{i}{\sqrt{2}} e^{-i\varphi} \sin \psi & e^{-i(\psi+\varphi)} \cos^2 \frac{\psi}{2} \end{pmatrix}.$$

156. Koosnegu süsteem protonist ja neutronist, mille spinide vastastikust mõju võib jätta arvestamata. Leida summaarse spini $\vec{S} = \vec{S}_p + \vec{S}_n$ omaväärtused ja omafunktsioonid ja analüüsida viimaste sümmeetriat.

Märkus: Interaktsiooni puudumise tõttu võib koguspini omafunktsioone otsida kummalegi osakesele vastavate spinfunktsioonide korrutiste lineaarkombinatsioonina, s. o. $\chi =$

$$= \alpha \chi_+(p) \chi_+(n) + \beta \chi_+(p) \chi_-(n) + \gamma \chi_-(p) \chi_+(n) + \delta \chi_-(p) \chi_-(n),$$

kus $\chi_{\pm}(p)$ ($\chi_{\pm}(n)$) on prootoni (neutroni) spinfunktsioon, mis vastab $\hat{S}_z(p)$ ($\hat{S}_z(n)$) omaväärtusele $+\frac{\hbar}{2}$ või $-\frac{\hbar}{2}$. Silmas pidades \hat{S}_z kuju, $\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$,

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Operaatorites $\hat{S}_z = \hat{S}_z(p) + \hat{S}_z(n)$ ja $\hat{S}^2 = \hat{S}^2(p) + \hat{S}^2(n) + 2\hat{S}(p)\hat{S}(n)$ toimivad tegurid $\hat{S}(p)$ ($\hat{S}(n)$) ainult funktsioonidele $\chi(p)$ (vastavalt $\chi(n)$), näiteks

$$\sigma_x(p) \chi_+(p) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \chi_-(p).$$

Analoogiliselt

$$\sigma_y \chi_+ = i \chi_-; \quad \sigma_z \chi_+ = \chi_+; \quad \sigma^2 \chi_+ = 3 \chi_+;$$

$$\sigma_x \chi_- = \chi_+; \quad \sigma_y \chi_- = -i \chi_+; \quad \sigma_z \chi_- = -\chi_-; \quad \sigma^2 \chi_- = 3 \chi_-.$$

Vastus: \hat{S}^2 omaväärtusele $\hbar^2 s(s+1)$ vastavad järgmised omafunktsioonid:

a) kui $S = 1$:

m_s

$$+1 \quad \psi_+ = \chi_+(p) \chi_+(n),$$

$$0 \quad \psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_+(p) \chi_-(n) + \chi_-(p) \chi_+(n)],$$

$$-1 \quad \psi_- = \chi_-(p) \chi_-(n);$$

b) kui $S = 0$, $m_s = 0$:

$$\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_+(p) \chi_-(n) - \chi_-(p) \chi_+(n)].$$

157. Lahendada eelmisega analoogiline ülesanne, kui süsteem koosneb kahest osakesest spiniga 1.

Märkus: Spinmaatriksite kuju vt. ül. 154! Antud juhul tuleb summaarsele spinile vastavate operaatorite

$$\hat{S}_z = \hat{S}_z(1) + \hat{S}_z(2); \quad \hat{S}^2 = \hat{S}^2(1) + \hat{S}^2(2) + 2\hat{S}_z(1)\hat{S}_z(2) +$$

$$+ [\hat{S}_x(1) + i\hat{S}_y(1)][\hat{S}_x(2) - i\hat{S}_y(2)] + [\hat{S}_x(1) - i\hat{S}_y(1)] \cdot$$

$$\cdot [\hat{S}_x(2) + i\hat{S}_y(2)]$$

ühiseid omafunktsioone otsida üheksa liikme kombinatsioonina

$$a_1 \chi_+(1) \chi_+(2) + a_2 \chi_+(1) \chi_0(2) + a_3 \chi_+(1) \chi_-(2) +$$

$$+ a_4 \chi_0(1) \chi_+(2) + \dots + a_9 \chi_-(1) \chi_-(2).$$

Enne lahendamata omaväärtusprobleem \hat{S}_z jaoks, mis võimaldab palju koefitsientide nulliga võrrutada, seejärel leida \hat{S}^2 omaväärtused ja omafunktsioonid.

Vastus:

$$S = 0, m_S = 0: \psi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{3}} [\chi_0(1)\chi_0(2) - \chi_+(1)\chi_-(2) - \chi_-(1)\chi_+(2)];$$

$$S = 1, m_S = 1: \psi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_+(1)\chi_0(2) - \chi_0(1)\chi_+(2)],$$

$$m_S = 0: \psi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_+(1)\chi_-(2) - \chi_-(1)\chi_+(2)],$$

$$m_S = -1: \psi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_0(1)\chi_-(2) - \chi_-(1)\chi_0(2)];$$

$$S = 2, m_S = 2: \psi(1,2) = \chi_+(1)\chi_+(2),$$

$$m_S = 1: \psi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_+(1)\chi_0(2) + \chi_0(1)\chi_+(2)],$$

$$m_S = 0: \psi(1,2) = \sqrt{\frac{2}{3}} [\chi_0(1)\chi_0(2) + \frac{1}{2}\chi_+(1)\chi_-(2) + \frac{1}{2}\chi_-(1)\chi_+(2)],$$

$$m_S = -1: \psi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_0(1)\chi_-(2) + \chi_-(1)\chi_0(2)],$$

$$m_S = -2: \psi(1,2) = \chi_-(1)\chi_-(2).$$

158. Koosnegu süsteem kahest identsest osakesest spini-
ga I . Näidata, et sümmeetriliste spinfunktsioonidega ise-
loomustatud olekute arvu suhe antisümmeetriliste spinfunktsi-
oonidega olekute arvusse on $\frac{I+1}{I}$.

Märkus: Osakese A ja B spinfunktsioonidest on võima-
lik moodustada $(2I+1)^2$ erinevat korrutatist $\chi_i(A) \chi_k(B)$,
kus $i, k = -I, -I+1, \dots, +I$. Kui $i = k$, saame
 $2I+1$ sümmeetrilist funktsiooni. Ülejäänud funktsioonidest
($i \neq k$) saab moodustada võrdsel arvul sümmeetrilisi ja anti-
sümmeetrilisi kombinatsioone (kõikide kombinatsioonide arv
peab võrduma sõltumatute funktsioonide arvuga). Kokku saame
 $(I+1)(2I+1)$ sümmeetrilist ja $I(2I+1)$ antisüm-
meetrilist funktsiooni.

159. Tsentraalsümmeetrilises väljas viibivat elektroni
iseloomustavad 3 omavahel kommuteeruvat operaatorit \hat{J}_z, \hat{J}^2
ja \hat{M}^2 , kus $\hat{J} = \hat{M} + \hat{S}$ on kogumomendi operaator. Lei-
da nende operaatorite ühised omafunktsioonid.

Märkus: Arvestades \hat{S} esitust Pauli maatriksite abil,
saame \hat{J}_z omaväärtusvõrrandi:

$$\begin{pmatrix} \hat{M}_z + \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & \hat{M}_z - \frac{\hbar}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \hbar m \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}.$$

Kuna ψ_1 ja ψ_2 eraldi peavad olema ka \hat{M}^2 omafunktsiooni-
deks, siis

$$\begin{aligned} \psi_1 &= R_1(r) Y_{l, m-\frac{1}{2}}(\vartheta, \varphi); \\ \psi_2 &= R_2(r) Y_{l, m+\frac{1}{2}}(\vartheta, \varphi). \end{aligned}$$

\hat{J}^2 omaväärtusprobleemi võib analoogiliselt esitada maatriks-
kujus:

$$\begin{pmatrix} \hat{M}^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + \hbar \hat{M}_z & \hat{M}_x - i\hat{M}_y \\ \hat{M}_x + i\hat{M}_y & \hat{M}^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 - \hbar \hat{M}_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \hbar^2 j(j+1) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}.$$

Siin on sobiv arvestada eespool tuletatud (vrd. näit. ül.

153) \hat{M}^2 , \hat{M}_z ühiste omafunktsioonide (kerapinnafunktsioonid) omadusi:

$$(\hat{M}_x + i\hat{M}_y) \psi_{\ell m} = \hbar \sqrt{(\ell-m)(\ell+m+1)} \psi_{\ell, m+1};$$

$$(\hat{M}_x - i\hat{M}_y) \psi_{\ell m} = \hbar \sqrt{(\ell+m)(\ell-m+1)} \psi_{\ell, m-1}.$$

Vastus:

$$\psi_{\ell, j=\ell+\frac{1}{2}, m} = R(n) \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{\ell+m+\frac{1}{2}}{2\ell+1}} \psi_{\ell, m-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{\frac{\ell-m+\frac{1}{2}}{2\ell+1}} \psi_{\ell, m+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}, \ell=0,1,2,$$

$$\psi_{\ell, j=\ell-\frac{1}{2}, m} = R(n) \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{\ell-m+\frac{1}{2}}{2\ell+1}} \psi_{\ell, m-\frac{1}{2}} \\ -\sqrt{\frac{\ell+m+\frac{1}{2}}{2\ell+1}} \psi_{\ell, m+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}, \ell=1,2,3.$$

160. Kasutades eelmise ülesande vastust leida elektroni orbitaalse momendi ja spini projektsiooni võimalikud väärtused ja nende tõenäosused ning arvutada projektsioonide kesk-
väärtused.

Vastus:

$$\overline{M_z} = \frac{2m\ell}{2\ell+1}, \quad \overline{S_z} = \frac{m}{2\ell+1}, \quad \text{kui } j = \ell + \frac{1}{2};$$

$$\overline{M}_z = \frac{2m(\ell+1)}{2\ell+1}, \quad \overline{S}_z = -\frac{m}{2\ell+1}, \quad \text{kui } j = \ell - \frac{1}{2}.$$

161. Kasutades Pauli maatriksite omadusi, kontrollida järgmise seose kehtivust:

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{A})(\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) = (\vec{A} \cdot \vec{B}) + i \vec{\sigma} \cdot [\vec{A} \times \vec{B}],$$

kus \vec{A} , \vec{B} on mõnesugused vektorid, mis kommuteeruvad Pauli maatriksitega.

162. Kontrollida järgmiste seoste kehtivust:

$$a) [\hat{J}^2, \hat{A}] = i ([\hat{A} \times \hat{J}] - [\hat{J} \times \hat{A}]),$$

$$b) [\hat{J}^2, [\hat{J}^2, \hat{A}]] = 2(\hat{J}^2 \hat{A} + \hat{A} \hat{J}^2) - 4\hat{J}(\hat{J} \hat{A}),$$

$$c) (\hat{A})_{j m, j m'} = \frac{1}{j(j+1)} (\hat{J} \hat{A})_{j, j} (\hat{J})_{j m, j m'},$$

kui \hat{J} on impulssmomenti operaator, \hat{A} - mõnesugune vektoroperaator (näit. osakese impulss või raadiusvektor), mis rahuldab kommutatsioonieskirju $[\hat{J}_i, \hat{A}_k] = i \varepsilon_{ikl} \hat{A}_l$.

Seoses c) tuleb arvutada maatriksielement olekutes, mis on määratud \hat{J}^2 omaväärtusega j ja \hat{J}_z omaväärtustega m , m' .

Märkus: Seosed a), b) järgnevad vahetult kommutatsioonieskirjadest \hat{J}_i , \hat{A}_k jaoks, kuna seose c) saame, kui moodustame vastava maatriksielemendi seose b) mõlemast pooldest ning arvestame, et $\hat{J}^2 \psi_{j, m} = j(j+1) \psi_{j, m}$, ($\hbar=1$).

163. Leida operaatori $\hat{M} = g_1 \hat{J}_1 + g_2 \hat{J}_2$ keskväertus olekus, mis on iseloomustatud summaarse impulssmomenti $\hat{J} = \hat{J}_1 + \hat{J}_2$ kvantarvudega j , m ja operaatorite \hat{J}_1^2 ja \hat{J}_2^2 kvantarvudega j_1 , j_2 (interaktsioon impulssmoment-

tide \vec{J}_1 ja \vec{J}_2 vahel puudub).

Märkus: Operaatorite \hat{J}_1 ja \hat{J}_2 kommutatsioonieskirjadest järgneb:

$$[\hat{J}_i, \hat{\mu}_k] = i \varepsilon_{ikl} \hat{\mu}_l,$$

mistõttu $\hat{\mu}$ keskvärtuse arvutamiseks võib kasutada eelmises ülesandes tuletatud seost c).

Vastus:

$$\overline{\mu}_1 = \overline{\mu}_2 = 0,$$

$$\overline{\mu}_3 = m \left\{ \frac{1}{2}(g_1 + g_2) + \frac{1}{2}(g_1 - g_2) \frac{j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)}{j(j+1)} \right\}.$$

164. Arvutada tuuma N^{15} magnetmoment, arvestades, et tuuma kõik kihid oleksid täidetud, kui sinna lisanduks üks prooton olekus $\nu_{\frac{1}{2}}$. Vaba prootoni magnetmoment on $\mu_p = 2,79$ (tuumamagneton on võetud ühikuks).

Märkus: Arvestada, et täidetud nivoodel on nii summaarne orbitaalne moment kui ka summaarne spin null, mistõttu nivood iseloomustavad kvantarvud $l = 1$, $j = \frac{1}{2}$ (antud näites). Tuuma magnetmomendiks nimetatakse operaatori

$$\hat{\mu} = g_L \sum_{K=1}^Z \hat{M}_K + g_P \sum_{K=1}^Z \hat{S}_K + g_N \sum_{K=1}^{A-Z} \hat{S}_K$$

keskväärtust olekus $m = j$, kus m, j on summaarset momenti \hat{J} iseloomustavad kvantarvud ($-j \leq m \leq +j$).

$g_L = 1$ on prootoni orbitaalse momendi güromagnetiline suhe (vastav g neutronite korral on null); $g_P = 5,58$, $g_N = -3,82$. Ühe puuduva prootoni korral võib kasutada eelmises ülesandes tuletatud $\overline{\mu}_3$ avaldist, asendades (konkreetsel juhul) kvantarvud vastavalt: $m = j = \frac{1}{2}$, $g_1 = 1$, $g_2 = 5,58$, $j_1 = 1$, $j_2 = \frac{1}{2}$.

Vastus:

$$\mu = -0,26.$$

165. Arvutada tuuma O^{17} magnetmoment, kui vastav tuum sisaldab peale täidetud kihtide ühe neutroni olekus $d \frac{5}{2}$, vaba neutroni magnetmoment on $\mu_n = -1,91$.

Märkus: Ülesande lahenduskäik on täiesti analoogiline eelmise ülesande omaga.

Vastus:

$$\mu = -1,91.$$

166. Leida deutroni magnetmoment järgmistes olekutes:

a) 2S_1 , b) 3P_1 , c) 3D_1 .

Märkus: Deutroni magnetmomendi operaatoril on kuju:

$$\hat{\vec{\mu}}_d = \hat{\vec{M}}_p + g_p \hat{\vec{S}}_p + g_n \hat{\vec{S}}_n. \quad (1)$$

Massikeskme süsteemis $\hat{\vec{M}}_p = \frac{1}{2} \hat{\vec{M}}$ ja

$$\hat{\vec{\mu}}_d = \frac{1}{2} \hat{\vec{M}} + \frac{1}{2} (g_n + g_p) \hat{\vec{S}} + \frac{1}{2} (g_n - g_p) \hat{\vec{S}}_-, \quad (2)$$

kus $\hat{\vec{S}} = \hat{\vec{S}}_p + \hat{\vec{S}}_n$, $\hat{\vec{S}}_- = \hat{\vec{S}}_n - \hat{\vec{S}}_p$.

Tripletses olekus $\hat{\vec{S}}_- = 0$. Operaatorite $\hat{\vec{M}}$ ja $\hat{\vec{S}}$ kesk-
väärtuse arvutamiseks võib kasutada seost c) ülesandest 162,
avaldades

$$\vec{J} \vec{M} = \frac{1}{2} (M^2 + J^2 - S^2); \quad \vec{J} \vec{S} = \frac{1}{2} (S^2 + J^2 - M^2).$$

Vastus:

a) $\mu_s = 0,88$; b) $\mu_p = 0,69$; c) $\mu_D = 0,31$.

167. Oletades, et deutroni põhiolekuks on 3S_1 ja 3D_1 olekute superpositsioon, leida 3D_1 olekus statistiline

kaal, kui deutroni magnetmoment võrdub $\mu_d = 0,85$.

Märkus: Kasutades μ_d avaldist eelmisest ülesandest, on otsitavale μ väärtusele kindla L väärtusega triplet-
ses olekus võimalik anda kuju:

$$\mu = \frac{1}{4} \frac{L(L+1) + J(J+1) - S(S+1)}{J(J+1)} +$$

$$+ \frac{1}{4} (g_n + g_p) \frac{S(S+1) + J(J+1) - L(L+1)}{J(J+1)}. \quad (1)$$

Kui tegelik olek on S ja D segu, tuleb siin $L(L+1)$ asendada avaldisega

$$L(L+1) \Big|_{L=0} W_S + L(L+1) \Big|_{L=2} W_D = 6 W_D, \quad (2)$$

kus W_S on S -oleku tõenäosus, W_D - D -oleku tõenäosus (antud ülesandes otsitav).

Arvutades μ valemitest (1), (2) ja võrreldes eksperimenti andmetega, saamegi W_D .

Vastus:

$$W_D \approx 0,04.$$

168. Näidata, et kahest poolespinilisest osakesest koosnevas süsteemis on summaarse spini absoluutväärtus liikumisintegraaliks, kui süsteemi hamiltoniaan on sümmeetriline osakeste spinide suhtes.

Märkus: Mistahes kahest fermionist (spiniga $\frac{1}{2}$) koosneva süsteemi spinfunktsiooni võib esitada kujul

$$\psi = \sum_{i,k=1}^2 a_{ik} \varphi_i \chi_k,$$

kus a_{ik} on sümmeetrilised või antisümmeetrilised indeksid

tes i, κ ; φ_i on esimese osakese, χ_{κ} - vastavalt teise osakese spini projektsiooni \hat{S}_z omafunktsioonid:

$$\varphi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \varphi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \chi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \chi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Kasutades seoseid

$$\begin{aligned} \sigma_x \varphi_1 &= \varphi_2, & \sigma_x \varphi_2 &= \varphi_1, \\ \sigma_y \varphi_1 &= -i \varphi_2, & \sigma_y \varphi_2 &= i \varphi_1, \\ \sigma_z \varphi_1 &= \varphi_1, & \sigma_z \varphi_2 &= -\varphi_2 \end{aligned}$$

ja analoogilisi seoseid χ_{κ} jaoks, saab näidata, et $\hat{S}_f^2 = = \left(\frac{3}{2}I + 2\hat{P}_{12}\right) f$, kus \hat{P}_{12} on osakeste vahetamise operaator.

Kui hamiltoniaan on invariantne osakeste spinide ümberpaigutamise suhtes, siis ta kommuteerub operaatoriga \hat{P}_{12} .

169. Neutroni ja prootoni interaktsiooni S -olekus võib esitada ainult kaugusest sõltuva funktsioonina, mis on erinev singuletses ja tripletses olekus. Asendada kaks erinevat potentsiaali ühe spinolekutest sõltuvaga, kasutades a) spinide vahetamise operaatorit \hat{P}_{np} , b) mõlemate osakeste spinvektoreid $\vec{\sigma}_n$ ja $\vec{\sigma}_p$. Leida seos operaatori \hat{P}_{np} ning $\vec{\sigma}_n$, $\vec{\sigma}_p$ vahel.

Märkus: a) Kui tähistame spinfunktsiooni tripletsel juhul $\chi_+(S_n, S_p)$, singuletsel juhul $\chi_-(S_n, S_p)$, siis on operaatori $\hat{P}_{np} \chi(S_n, S_p) = \chi(S_n, S_p)$ omaväärtused χ_+ korral $+1$, χ_- korral -1 . Seega, kui defineerida potentsiaal $\hat{V} = V_1(r) + V_2(r) \hat{P}_{np}$, asendub ta χ_+ -le mõjudes avaldisega $V_+ = V_1 + V_2$, χ_- -le mõjudes vastavalt $V_- = V_1 - V_2$. Neid seoseid kasutades võime otsekohe avaldada \hat{V} seose V_+ ja V_- kaudu.

b) Kuna interaktsiooni energia võib sõltuda ainult spinvektorite $\vec{\sigma}_n$, $\vec{\sigma}_r$ skalaarkorrutisest, kirjutame \hat{V} kujul

$$\hat{V}(n) = W_1(n) + W_2(n) (\vec{\sigma}_n \vec{\sigma}_r)$$

ja leiame operaatori $(\vec{\sigma}_n \vec{\sigma}_r)$ omaväärtused tripletses ja singuletses olekus. Selleks kasutame avaldist

$$\hat{S}^2 = (\vec{\sigma}_n + \vec{\sigma}_r)^2 = \sigma_n^2 + \sigma_r^2 + 2(\vec{\sigma}_n \vec{\sigma}_r),$$

kusjuures $S^2 = 8$ tripletses ja $S^2 = 0$ singuletses olekus. Nendest kaalutlustest leiame nagu eelmiselgi juhul V_+ ja V_- , mille kaudu avaldame W_1 , W_2 ja V . Tulemuste võrdlus annab seose \hat{P}_{nr} ja $\vec{\sigma}_n$, $\vec{\sigma}_r$ vahel.

Vastus:

$$a) \hat{V} = \frac{1}{2}(V_+ + V_-) + (V_+ - V_-) \hat{P}_{nr},$$

$$b) \hat{V} = \frac{1}{4}(3V_+ + V_-) + \frac{1}{4}(V_+ - V_-)(\vec{\sigma}_n \vec{\sigma}_r),$$

$$\hat{P}_{nr} = \frac{1}{2} [1 + (\vec{\sigma}_n \vec{\sigma}_r)].$$

170. Näidata, et operaator $(\vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2)^n$ kahe osakese 1 ja 2 puhul avaldub lineaarselt $(\vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2)$ kaudu.

Märkus: Kuna mistahes spinfunktsiooni võime esitada kolme χ_+ ja ühe χ_- lineaarkombinatsioonina (tähistused vt. eelmise ülesande märkuses), piisab, kui uurime $(\vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2)^n$ mõju funktsioonidele χ_+ ja χ_- , pidades silmas, et

$$(\vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2) \chi_+ = \chi_+; (\vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2) \chi_- = -3 \chi_-,$$

(vrd. eelmise ülesande lahenduskäiguga). $(\vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2)^n$ otsime kujus

$$(\vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2)^n = A + B (\vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2).$$

Vastus:

$$(\vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2)^n = \frac{1}{4} [3 + (-3)^n] + \frac{1}{4} [1 - (-3)^n] (\vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2).$$

171. Leida ühest neutronist ja kahest protonist koosneva süsteemi spinfunktsioonid ja koguspini omaväärtused eeldusel, et protonid kuuluvad vesiniku molekuli koosseisu.

Märkus: Vaadelda eraldi paravesinikku (prootonite spinid antiparalleelsed) ja ortovesinikku (prootonite spinid paralleelsed). Koguspin $\vec{S} = \vec{\sigma}_n + \vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2$ (prootonid on tähistatud vastavalt indeksitega 1 ja 2). Leida tuleb operaatorite

$$S^2 = 9 + 2 (\vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2) + 2 (\vec{\sigma}_n, \vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \text{ ja } \hat{S}_z = \sigma_{n,z} + \sigma_{1,z} + \sigma_{2,z}$$

ühised omafunktsioonid $\chi(S_n, S_1, S_2)$.

Põhimõtteline arvutuskäik on sama mis üllesandes 156.

Vastus:

Paravesinik:

$$S = \frac{1}{2}, m_s = \frac{1}{2}: \chi_1 = (\alpha_1 \beta_2 - \beta_1 \alpha_2) \alpha_n,$$

$$m_s = -\frac{1}{2}: \chi_2 = (\alpha_1 \beta_2 - \beta_1 \alpha_2) \beta_n;$$

Ortovesinik:

$$S = \frac{3}{2}, m_s = \frac{3}{2}: \chi_1 = \alpha_1 \alpha_2 \alpha_n,$$

$$m_s = \frac{1}{2}: \chi_2 = \alpha_1 \alpha_2 \beta_n + (\alpha_1 \beta_2 + \beta_1 \alpha_2) \alpha_n,$$

$$m_s = -\frac{1}{2}: \chi_3 = \beta_1 \beta_2 \alpha_n + (\alpha_1 \beta_2 + \beta_1 \alpha_2) \beta_n,$$

$$m_s = -\frac{3}{2}: \chi_4 = \beta_1 \beta_2 \beta_n;$$

$$S = \frac{1}{2}, m_s = \frac{1}{2}: \chi_5 = \alpha_1 \alpha_2 \beta_n - \frac{1}{2} (\alpha_1 \beta_2 + \beta_1 \alpha_2) \alpha_n,$$

$$m_s = -\frac{1}{2}: \chi_6 = \beta_1 \beta_2 \alpha_n - \frac{1}{2} (\alpha_1 \beta_2 + \beta_1 \alpha_2) \beta_n.$$

Siin on tähistused järgmised: sümbol α on antud osakese spini projektsiooni omafunktsioon omaväärtusel $+\frac{1}{2}$, β - vastavalt omaväärtusel $-\frac{1}{2}$.

172. Aeglaste neutronite voog langeb vesinikumolekulidele. Kirjeldagu neutroni ja prootoni vastastikust mõju spiniist sõltuv tsentraalsümmeetriline potentsiaal (ül. 169). Leida Borni lähenduses neutronite hajumise efektiivne ristlõige orto- ja paravesinikul.

Märkus: Aeglaste neutronite korral (de Broglie' lainepikkus on palju suurem molekuli mõõtmeist) võib molekuli lüheda punktikujuliseks ja kaugust neutroni ja kummagi prootoni vahel võrdseks. Siis võib vastavalt ülesande 169 tulemustele interaktsioonipotentsiaali kirjutada:

$$\hat{V}(r, s_n, s_1, s_2) = \frac{1}{2} (3V_+ + V_-) + \frac{1}{4} (V_+ - V_-)(\vec{\sigma}_n, \vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2),$$

kus $V_{\pm} = V_{\pm}(r)$. Arvestades spinfunktsioonide struktuuri (ül. 171) ja operaatori $(\vec{\sigma}_n, \vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2)$ mõju neile saame orto-

vesiniku korral, kui $s = \frac{3}{2}$, $V = 2V_n$

$$s = \frac{1}{2}, \quad V = \frac{1}{2}(V_+ + 3V_-);$$

paravesiniku korral

$$V = \frac{1}{2}(3V_+ + V_-).$$

Edasi avaldada hajumisamplituud f V kaudu, kasutades Borni lähendust (vt. lisa A!).

Vastus:

$$f_{para} = \pi [3f_+ + f_-]^2,$$

$$f_{orto} = \pi [(3f_+ + f_-)^2 + 2(f_+ - f_-)^2],$$

kus f_+ (f_-) on potentsiaalile V_+ (V_-) vastav hajumisamplituud.

173. Olgu ergutatud tuum A spiniga 1 paarisolekus. Olgu energeetiliselt lubatud tuuma A α -lagunemine järgmise skeemi kohaselt:

$$A \rightarrow B + \alpha$$

kus tekkinud tuuma spin on null. Kontrollida, kas nimetatud reaktsiooni korral on rahuldatud impulssmomenti ja paarsuse jäävuse seadus.

Märkus: α - osakese spin on null, mistõttu B ja α suhtelise liikumise orbitaalne moment peab impulssmomenti jäävuse seaduse kohaselt võrduma ühega. Seega on tekkinud süsteemi paarsus - 1.

Vastus: Ei ole.

174. Kas võib ergutatud tuum $B\alpha$ $\frac{3}{4}$, mille spin on 1, laguneda kaheks α -osakeseks?

Märkus: Kahe α -osakese suhtelise liikumise impulssmoment on alati paarisarv, kuna nende spinid on nullid ja nende kõik olekufunktsioonid peavad olema sümmeetrilised, s. t. suhtelisele liikumisele vastavad paarisfunktsioonid.

Vastus: Ei või.

175. Arvestades, et ainsat prootonist ja neutronist koosnevad seotud süsteemi - deutronit - iseloomustab spin 1 ja paarsus + 1 ning et (n, n) ja (n, p) vahel mõjuvad võrdsed tungid, näidata, et 2 neutronit ei või moodustada seotud süsteemi.

Märkus: Pidada silmas Pauli printsipi.

176. Olgu kahest mesonist \bar{K}^+ ja K^- koosnev süsteem

kindlale suhtelise liikumise orbitaalsele momendile (kvant-
arv l) vastavas olekus.

Näidata, et reaktsioon



võib toimuda vaid siis, kui l on paarisarv.

Märkus: Arvestada, et $\bar{\pi}^0$ -mesoni spin on 0. Edasi-
ne argumentatsioon on analoogiline nagu ülesandes 174.

177. Näidata, et protsessi



küllalt suurest tõenäosusest järgneb, et $\bar{\pi}^-$ -mesonitel on
negatiivne seesmine paarsus. Eeldatud on, et deutron haarab
 $\bar{\pi}^-$ -mesoni mesodeuteeriumi S -tasemelt.

Märkus: Kuna $\bar{\pi}^- + d$ kogumoment võrdub d spiniga,
s. o. 1, peab ka kahest neutronist koosneva süsteemi kogu-
moment võrduma ühega. Pauli printsiipi arvestades on see või-
malik vaid siis, kui $l = 1$, $S = 1$. Arvestada ka, et
 d paarsus on + 1.

178. Kasutades kahest nukleonist koosneva süsteemi iso-
toopiliste spinide liitmise reeglit (analoogiline harilike
spinide liitmise reegluga ülesandes 156), näidata, et kuna
deutroni isospin $T = 0$, deutroni põhiolek on 3S ja 3D
superpositsioon.

Märkus: Kuna kahest erinevast nukleonist koosneva süsteemi
isospini komponent $T_3 = 0$ (vrd. ül. 156, kui erinevate-
le nukleonidele tuleb vastavusse seada märgi poolest erine-
vad isospini projektsioonid), võivad deutronit kirjeldada
isospini omafunktsioonid

$$\chi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha^{(1)} \beta^{(2)} \pm \alpha^{(2)} \beta^{(1)}],$$

kus α on prootse oleku, β - neutroonse oleku funktsioon.

Kooskõlas üldistatud Pauli printsibiga, mis arvestab ka isospini, on lubatud ainult funktsioon χ_{-} , mis vastab väärtusele $T = 0$.

179. Süsteem koosneb kahest osakesest a , b isospinidega $\tau^{(a)} = 1$ ja $\tau^{(b)} = \frac{1}{2}$ vastavalt. Viibigu süsteem olekus, kus süsteemi isospin on $\tau = \frac{1}{2}$ ja $\tau_3 = \frac{1}{2}$. Lei-
da kumagi osakese isospinide komponentide $\tau_3^{(a)}$ ja $\tau_3^{(b)}$ võimalikud väärtused ja vastavad tõenäosused.

Märkus: Isospini operaatoril on täpselt analoogilised omadused vastavate spinmaatriksitega (rahuldavad samu kommutatsiooniseoseid nagu impulsmomendi operaatoridki). Seetõttu kvantarvadega τ ja τ_3 määratud olekus on kindel väärtus ka kvantarvudel $\tau^{(a)}$ ja $\tau^{(b)}$. $\tau_3^{(a)}$ ja $\tau_3^{(b)}$ võimalikud väärtused leitakse tingimustest:

$$\tau_3 = \tau_3^{(a)} + \tau_3^{(b)} \quad (1)$$

ja

$$\tau_3^{(a)} = \tau^{(a)}, \tau^{(a)} - 1, \dots, -\tau^{(a)} \quad (2)$$

(analoogiline väärtuste piirkond kehtib $\tau_3^{(b)}$ jaoks). Et leida vastavaid tõenäosusi, tuleb \hat{T}^2 ja \hat{T}_3 ühine omafunktsioon χ_{τ, τ_3} arendada üksikosakeste vastavate omafunktsioonide korrutiste $\chi_{\tau, \tau_3}^{(a)} \chi_{\tau, \tau_3}^{(b)}$ järgi (siin on arvestatud tingimust (1)).

Antud ülesandes saame, arvestades $\tau_3^{(a)}$ ja $\tau_3^{(b)}$ võimalikke väärtusi, järgmise arenduse:

$$x_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = C_1 x_{1,1}^a x_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}^b + C_2 x_{1,0}^a x_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^b. \quad (3)$$

Kordajate C_1 , C_2 leidmiseks rakendame (3) mõlemale poolele operaatorit

$$\hat{T}^2 = \hat{T}_a^2 + \hat{T}_b^2 + \hat{T}_+^a \hat{T}_-^b + \hat{T}_-^a \hat{T}_+^b + 2\hat{T}_3^a \hat{T}_3^b,$$

kus

$$\hat{T}_\pm = \hat{T}_1 \pm i\hat{T}_2$$

ning peame silmas, et \hat{T}^2 omaväärtused on $\tau(\tau+1)$.

\hat{T}_\pm mõju vastavatele \hat{T}_3 omafunktsioonidele on sama, mis \hat{J}_\pm mõju \hat{J}_3 omafunktsioonidele ülesandes 153. Seal esinevad kvantarvud j ja β_k tuleb asendada vastavalt kvantarvudega τ ja τ_3 .

Vastus:

$$\tau_3^a = 1, \tau_3^b = -\frac{1}{2} \quad \text{tõenäosus on } \frac{2}{3},$$

$$\tau_3^a = 0, \tau_3^b = \frac{1}{2} \quad \text{tõenäosus on } \frac{1}{3}.$$

180. Kasutades isospini liitmise ja jäävuse seadusi näidata, et protsesside

$$p+d \rightarrow d+n+\pi^+, \quad (1)$$

$$p+d \rightarrow d+p+\pi^0 \quad (2)$$

diferentsiaalsete efektiivsete ristlõigete ($d\sigma_1$, ja $d\sigma_2$ vastavalt) suhe on

$$d\sigma_1 : d\sigma_2 = 2,$$

kui osakeste suhtelised energiad, hajumisnurgad ja spinide

vastastikused orientatsioonid on ühesugused mõlemas reaktsioonis.

Märkus: Deutroni isospin τ ja tema kolmas komponent τ_3 on mõlemad nullid, prootoni korral $\tau = \tau_3 = \frac{1}{2}$. π^+ korral $\tau = 1$, $\tau_3 = +1$, neutronil $\tau = \frac{1}{2}$, $\tau_3 = -\frac{1}{2}$, π^0 korral $\tau = 1$, $\tau_3 = 0$. Seega reaktsioonis (1) peab süsteemil $n + \pi^+$ olema isospin $\tau = \frac{1}{2}$, $\tau_3 = \frac{1}{2}$; reaktsioonis (2) aga on samade väärtustega süsteem $p + \pi^0$. Kasutades eelmise ülesande tulemusi, on siit võimalik arvutada tõenäosus, et reaktsioonis tekivad osakesed etteantud τ_3 väärtusega. See tõenäosuste suhe annabki muude samaks jäävate tingimuste korral suhte $d\sigma_1/d\sigma_2$.

181. Kasutades analoogiat eelmise ülesandega, näidata, et reaktsioonid

$$n + p \rightarrow p + n + \pi^-,$$

$$n + p \rightarrow n + n + \pi^+$$

kulgevad samadel tingimustel ühesuguse tõenäosusega.

Märkus: Arvestada, et Pauli printsibi tõttu on süsteemide $p + p$ ja $n + n$ isospin $\tau = 1$.

182. Näidata, et homogeenses, ajast sõltuvas magnetväljas on Pauli võrrandile alluva osakese omafunktsioon esitatav koordinaatidest sõltuva funktsiooni ja spinmuutujast sõltuva funktsiooni korrutisena.

Märkus: Pauli võrrandi Hamiltoni operaator on $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$, kus $\hat{H}_0 = \frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + eV$, $\hat{H}_1 = -\mu_0 (\vec{\sigma} \cdot \vec{H})$ (vt. liisa A). Funktsiooni $\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$ otsida kujus:

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \varphi(\vec{r}, t) \begin{pmatrix} \chi_1(t) \\ \chi_2(t) \end{pmatrix}.$$

183. Elektron liigub risti homogeense magnetväljaga tugevusega \vec{H} , kusjuures elektroni spini projektsioon magnetvälja suunale on $+\frac{\hbar}{2}$. Alates hetkest $t=0$ satub elektron täiendavasse nõrka homogeensesse välja tugevusega \vec{H}' , kusjuures \vec{H}' on risti nii elektroni liikumise suunaga kui ka vektoriga \vec{H} . Milline on tõenäosus, et hetkel $t > 0$ elektroni spini projektsioon \vec{H} suunale on $-\frac{\hbar}{2}$?

Märkus: Kui koordinaadistik valida nii, et x -telg on paralleelne vektoriga \vec{H}' , y -telg elektroni liikumise suunaga ja z -telg vektoriga \vec{H} , saame järgmise võrrandi:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + \mu (\vec{\sigma} \vec{H}) \psi, \quad (1)$$

kui $t \leq 0$.

Siin $\mu = \frac{e\hbar}{2mc}$, $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ on Pauli spinmaatriksid. Kui tähistame spinifunktsiooni, mis vastab spini z -telje suunalise projektsiooni positiivsele väärtusele $\chi_1(x)$, negatiivsele väärtusele vastava $\chi_2(x)$, siis võime võrrandi (1) lahendi kirjutada kujul

$$\psi = e^{i(\kappa y - \omega t)} \chi_1(x), \quad (2)$$

kus $\hbar \omega = \hbar \omega_0 + \mu H$, $\hbar \omega_0 = \frac{\hbar \kappa^2}{2m}$ on vaba elektroni energia. Hetkest $t \geq 0$ alates otsime funktsiooni ψ kujus

$$\psi = e^{i(\kappa y - \omega_0 t)} [a(t) \chi_1(x) + b(t) \chi_2(x)], \quad (3)$$

võrrandis (1) aga asendub liige $\mu (\vec{\sigma} \vec{H})$ avaldisega

$\mu [\vec{\sigma} (\vec{H} + \vec{H}')]]$. Kordajad $a(t)$ ja $b(t)$ valemis (3) on

sobiv esitada kujus:

$$a(t) = A e^{-i \mathcal{E} t / \hbar}; \quad b(t) = B e^{-i \mathcal{E} t / \hbar}. \quad (4)$$

Siis saadakse konstantidele A , B homogeenne võrrandsüsteem, mille lahenduvuse tingimus määrab ka \mathcal{E} väärtused.

Vastus: Spini ümberorienteerumise tõenäosus on

$$W_- = \frac{\mathcal{H}'^2}{\mathcal{H}^2 + \mathcal{H}'^2} \sin^2 \tau; \quad \tau = \frac{\mu}{\hbar} \sqrt{\mathcal{H}^2 + \mathcal{H}'^2} t.$$

184. Osake spiniga $\frac{1}{2}$ viibib homogeenses magnetväljas $\vec{\mathcal{H}}(t)$, ($\vec{\mathcal{H}} \parallel \vec{z}$). Alghetkel $t = 0$ kirjeldagu osakest spinifunktsioon

$$\begin{pmatrix} e^{-i\alpha} \cos \delta \\ e^{i\alpha} \sin \delta \end{pmatrix}.$$

Leida spini projektsiooni keskvärtus koordinaattelgedele x , y .

Märkus: Kasutades Pauli võrrandid ja ülesande 182 tulemusi, saame spinifunktsioonile $\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$ järgmised võrrandid

(kui $\mathcal{H}_x = \mathcal{H}_y = 0$, $\mathcal{H}_z = \mathcal{H}(t)$):

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial x_1}{\partial t} = -\mu_0 \mathcal{H} x_1,$$

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial x_2}{\partial t} = \mu_0 \mathcal{H} x_2,$$

mille lahendamisel sisse jäävad konstandid leiame algtingimusest. Vastavate olekufunktsioonide abil arvutame näiteks $\overline{S_x}$:

$$\overline{S_x} = \frac{\hbar}{2} x^* \sigma_x x = \frac{\hbar}{2} (x_1^* x_2 + x_2^* x_1).$$

Vastus:

$$\overline{S_x} = \frac{\hbar}{2} \sin 2\delta \cos \left\{ \frac{2\mu_0}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}(t) dt - 2\alpha \right\},$$

$$\overline{S_y} = \frac{\hbar}{2} \sin 2\delta \sin \left\{ \frac{2\mu_0}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}(t) dt - 2\alpha \right\}.$$

185. Lähtudes eelmises ülesandes arvutatud spinifunktsioonist määrata niisuguse suuna polaarnurgad ϑ , φ , mille-

le homogeenses magnetväljas viibiva elektroni spini projektsioon on kindla väärtusega $+\frac{\hbar}{2}$. Näidata, et konstantses magnetväljas pretsesseerib see suund ümber magnetvälja suuna ringsagedusega $\frac{2\mu_0}{\hbar} \mathcal{H}$.

Märkus: Eelmises ülesandes esineval spinfunktsioonil on kuju

$$\chi = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} \cos \delta \exp \left[\frac{i\mu}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}(t) dt \right] \\ e^{i\alpha} \sin \delta \exp \left[-\frac{i\mu}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}(t) dt \right] \end{pmatrix}.$$

Nurkade δ, φ leidmiseks võrrelda ülesannet 146.

Vastus:

$$\delta = 2\alpha; \quad \varphi = 2\left(\alpha - \frac{\mu}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}(t) dt\right) + \frac{\pi}{2}.$$

186. Piirkonnas $x > 0$ eksisteerib homogeenne magnetväli $\mathcal{H}_x = \mathcal{H}_y = 0$, $\mathcal{H}_z = \mathcal{H}$. Tasandile $x = 0$ langeb piirkonnast $x < 0$ polariseeritud neutronite kimp. Leida neutronite peegeldumise tõenäosus, kui neutroneid iseloomustab impulss $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ ja spinid on orienteeritud paralleelselt magnetvälja suunale, s. t. $S_z = +\frac{\hbar}{2}$.

Märkus: Langevat, peegeldunud ja murdunud lainet võib otsida vastavalt kujus:

$$A \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{i\vec{k}_1 \vec{r}}, \quad B \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{i\vec{k}_2 \vec{r}}, \quad C \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{i\vec{k}_2 \vec{r}}.$$

A, B, C on konstandid. Laine levikuvektorid \vec{k}_1, \vec{k}_2 ja \vec{k} on seotud osakese kogue energiaga E ja magnetmomendiga μ järgmiselt:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} = E; \quad \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} = E + \mu \mathcal{H}.$$

Konstandid A, B, C leitakse olekufunktsiooni pidevuse-tingimusest pinnal $x = 0$.

Vastus:

$$R = \left(\frac{B}{A}\right)^4 = \left(\frac{k_x - k_{2x}}{k_x + k_{2x}}\right)^2; \quad k_{2x} = k_x \sqrt{1 + \frac{2m}{\hbar^2 k_x^2} \mu \hbar}; \quad k_y = 0.$$

187. Lähtudes Pauli võrrandist koos relativistlikkude liikmetega (vt. lisa A!), leida spinorbitaalsest mõjust tingitud parandus vesiniku aatomi energiatasemetele.

Märkus: Vesiniku aatomi spinorbitaalset mõju kirjeldab operaator: $\hat{H}' = \frac{\hbar^2 e^2}{2m^2 c^2} \frac{1}{n^3} \left(\vec{M} \vec{S} \right)$.

Kuna häiritusena vaadeldav operaator \hat{H}' kommuteerub kogumomendi operaatoriga $\vec{J} = \vec{M} + \vec{S}$, on sobiv valida lähtefunktsioonideks \vec{J}^2 omafunktsioonid. Siis on \hat{H}' keskväär-
 tus arvutatav valemist: $\frac{1}{\hbar^2} \vec{J}^2 = j(j+1) = l(l+1) + s(s+1) + \frac{2}{\hbar^2} \overline{MS}$.
 $\left(\frac{1}{n^3}\right)$ arvutamisel kasutada Laguerre'i polünoomide omadusi (vt. lisa B!).

Vastus:

$$\Delta E = \frac{m e^4}{2 \hbar^2} \frac{\alpha^2}{n^3} \left(-\frac{1}{j + \frac{1}{2}} + \frac{1}{l + \frac{1}{2}} \right).$$

188. Leida aatomi energiatasemete nihe, mis on tingitud tuuma liikumise arvestamisest, s. t. tuuma massi lõplikkusest.

Märkus: Tuleb leida tuuma kineetilisele energiale vastav operaator \hat{K} massikeskme koordinaadistikus. Operaatorile \hat{K} vastav parandusliige arvutatakse häiritusteooria abil, kus \hat{K} vaadeldakse häiritusena, kuna häirimata süsteemi olekufunktsioonideks on elektronide olekufunktsioonid lõpmata massiivse tuuma väljas.

Massikeskme süsteemis kehtib seos

$$\vec{P} + \sum_i \vec{p}_i = 0,$$

kus \vec{P} on tuuma, \vec{p}_i i-nda elektroni impulss (summeeritud on üle kõikide elektronide). See seos võimaldab operaatori

$$\hat{K} \text{ avaldada kujul} \\ \hat{K} = \frac{\hat{P}^2}{2M} = \sum_i \frac{\hat{p}_i^2}{2M} + \sum_{i \neq k} \frac{\hat{p}_i \hat{p}_k}{M}. \quad (1)$$

Vastavalt avaldisele (1) $\Delta E = \Delta E_1 + \Delta E_2$; ΔE_1 arvutamiseks võib kasutada viriaali teoreemi (elektronide keskmine kineetiline energia võrdub koguenergiaga miinusmärgiga (ül. 81)). ΔE_2 arvutamisel võib silmas pidada, et iga individuaalse seotud osakese korral $\langle \vec{p}_k \rangle = 0$ (vt. ül. 75).

Vastus: $\Delta E = \Delta E_1 = -\frac{m}{M} E$, kui mitmest elektronist koosneva süsteemi olekufunktsioon on esitatud üksikute elektronide olekufunktsioonide lihtsa korrutisena, s. t. vahetumõju ei arvesta.

189. Arvutada tuuma lõplikust massist tingitud parandus heeliumi aatomi tripletsetele ja singuletsetele energianivoo-
dele $1s n p$, kasutades individuaalsete elektronide olekufunktsioonidena vesinikusarnase aatomi olekufunktsioone efektiivsete laengutega (vrd. ül. 83).

Märkus: Vastavad olekufunktsioonid ja elektro-
ni jaoks on

$$\psi_{1s}(\vec{r}_1) = \sqrt{\frac{Z_1^3}{\pi}} e^{-Z_1 r_1}, \\ \psi_{np} = \frac{2 Z_2^2}{3} \frac{\sqrt{n^2-1}}{n^2} n e^{-\frac{Z_2 r}{n}} F(-n+2, 4, \frac{2 Z_2 r}{n}) Y_{10}(\theta, \varphi), \\ \psi_{\pm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{1s}(\vec{r}_1) \psi_{np}(\vec{r}_2) \pm \psi_{1s}(\vec{r}_2) \psi_{np}(\vec{r}_1)],$$

kus ψ_+ vastab para-, ψ_- - ortoheeliumile.

Vastus:

$$\Delta E = \Delta E_1 + \Delta E_2, \quad \Delta E_1 = -\frac{m}{M} E,$$

$$\Delta E_2 = \pm \frac{m}{M} \frac{64}{3} (\bar{z}_1 \bar{z}_2)^5 \frac{(\bar{z}_1 n - \bar{z}_2)^{2n-4}}{(\bar{z}_1 n + \bar{z}_2)^{2n+4}} n^3 (n^2 - 1).$$

(Ülemine märk vastab para-, alumine ortoheeliumi tasemele.)

190. Arvutada elektroni orbitaalsest liikumisest tingitud magnetväli vesiniku aatomi tsentris, kui elektron on olekus 2 p.

Märkus: Lähtuda elektrodünaamikas tuletatavast avaldisest

$$\vec{\mathcal{H}} = \frac{e}{\mu c} \frac{1}{r^3} [\vec{r} \times \vec{p}] = \frac{e}{\mu c} \frac{1}{r^3} \vec{M},$$

μ on elektroni mass, millest $\mathcal{H}_z = \frac{e\hbar}{\mu c} m \frac{1}{r^3}$ olekus, mida iseloomustab funktsioon $\psi_{n, \ell, m}(r, \vartheta, \varphi)$. $\mathcal{H}_x = \mathcal{H}_y = 0$.

Magnetväljatugevuse fikseeritud n ja ℓ väärtustega olekus saame, kui kvantarvule m omistame maksimaalse väärtuse $m = \ell$.

Vastus:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_z = -\frac{1}{12} \frac{e\hbar}{2\mu c} \left(\frac{\mu e^2}{\hbar^2}\right)^3 \quad \text{olekus } 2p \ (m = 1).$$

191. Kuidas muutub elektroni orbitaalse magnetmomenti väärtus vesiniku aatomis, kui arvestada tuuma liikumist?

Märkus: Osakese orbitaalne magnetmoment olekus ψ on arvutatav avaldisest

$$\vec{\mathcal{M}} = \frac{e}{2\mu c} \int \psi^* \hat{\vec{M}} \psi d\tau.$$

Kahest osakesest koosneva süsteemi korral massidega m_1 ja

m_2 ning laengutega e_1 ja e_2 vastavalt,

$$\vec{M}_b = \int \psi^* \left[\frac{e_1}{2m_1 c} \vec{M}_1 + \frac{e_2}{2m_2 c} \vec{M}_2 \right] \psi d\tau, \quad (1)$$

kus $\vec{M}_i = \frac{\hbar}{i} [\vec{n}_i \times \nabla_i]$, $i = 1, 2$; $d\tau = (d\vec{n}_1)(d\vec{n}_2)$.

Avaldises (1) asendada koordinaadid \vec{r}_1, \vec{r}_2 massikeskme koordinaatide \vec{R} ja suhteliste koordinaatide \vec{r} kaudu ning esitada $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi(\vec{R}) \varphi(\vec{r})$. Arvestada, et statsionaarses olekus koordinaatide x, y, z ja impulsside μ_x, μ_y, μ_z keskvaartused on nullid.

Vastus:

$$\mathcal{M}_b = - \frac{e}{2mc} \left(1 - \frac{m}{M}\right) \int \psi^* \vec{M}_2 \psi (d\vec{r}),$$

kus m on elektroni, M - tuuma mass.

192. Leida vesiniku aatomi ülipeenstruktuurile vastav energiaparandus ja arvutada ülipeenstruktuuri termide vahe põhiolekus.

Märkus: Ülipeenstruktuuri energia on tuuma ja elektroni magnetmomentide interaktsioonienergia. Arvestades elektroni laengut ja spini, võime elektroni magnetväljatugevuse operaatori \vec{H} tuuma kohal arvutada valemist

$$\vec{H} = \vec{H}_{orb.} + \vec{H}_{spin},$$

kus $\vec{H}_{orb.}$ on antud ülesandes 190, \vec{H}_{spin} on magnetdipooli $\vec{\mu} = \frac{e}{mc} \vec{S}$ väli, s. t.

$$\vec{H}_{spin} = \frac{3(\vec{\mu} \cdot \vec{n}_0) \vec{n}_0 - \vec{\mu}}{r^3} = \frac{e}{mc} \left[\frac{3(\vec{S} \cdot \vec{n}_0) \vec{n}_0}{r^2} - \vec{S} \right].$$

Häiritusenergia $E' = -\beta (\vec{l} \vec{K})$, kus $\beta \vec{l}$ on tuuma magnetmoment. E' keskvärtus olekus n, j, l annab otsitava energiaparanduse. Enne keskvärtuse arvutamist on sobiv avaldis $(\vec{l} \vec{K})$ teisendada kujusse $\sim (\vec{l} \vec{j})$ kasutades maatriksavaldist ülesandes 162 c. $(\vec{l} \vec{j})$ keskvärtus avaldub siis tuuma ja elektroni summaarse momendi $\vec{J} = \vec{l} + \vec{j}$ ruudu kvantarvude f, i^2 kvantarvude l ja j^2 kvantarvude j kaudu.

Vastus:

$$E' = -\frac{e \hbar}{2 m c} \beta \overline{\left(\frac{1}{r}\right)} \frac{l(l+1)}{j(j+1)} [f(f+1) - j(j+1) - i(i+1)].$$

Vesiniku aatomi korral $i = \frac{1}{2}$, $\beta = 2,7 \frac{e \hbar}{2 M c}$. $\overline{\left(\frac{1}{r}\right)}$ on keskvärtus radiaalosa funktsioonide $R_{n,l}$ järgi $\Delta E'$ (põhiolekus) = $0,0235 \text{ cm}^{-1}$.

193. N elektronist koosnevas süsteemis iseloomustab iga elektroni kvantarvude kolmik n, l, m_l . Määrata antud summaarse spini projektsioonile M_s vastavate võimalikkude olekute arv.

Märkus: $M_s = \sum_{k=1}^N m_s^{(k)} = \frac{1}{2} x - \frac{1}{2} (N-x)$, kus x on osakeste arv spini projektsiooniga $m_s = +\frac{1}{2}$. Tuleb vaadelda 2 juhtu: a) kui kõik kvantarvude kolmikud (n, l, m_l) on erinevad, b) kui leidub p paari kokkulangevate kolmikutega (n, l, m_l) . Olekute arv (g) võrdub arvuga, mis näitab, mitmel viisil on võimalik jaotada x elektroni erinevate kolmikute vahel.

Vastus: a) $g = \binom{N}{\frac{1}{2} N + M_s}$; b) $g = \binom{N-2p}{\frac{1}{2}(N-2p) + M_s}$.

194. Leida aatomi energiatasemete lõhenemine nõrgas magnetväljas, kui magnetväljast tingitud täiendav energia on palju väiksem alatasemete energiate vahedest ühe multiplleti piires.

Märkus: Antud tingimustel võib täiendavat energiat

$$\Delta \hat{E} = \frac{e\hbar}{2mc} (\hat{M}_z + 2\hat{S}_z) \mathcal{H}$$
 (z-telg on suunatud mööda magnetväljavektorit \mathcal{H}) arvutada häiritusarvutuse meetodiga. Häirimata olek on iseloomustatud kvantarvudega J, L, S, m_j . Kuna $\Delta \hat{E}$ mittediagonaalsed maatrikselemendid on nullid, võrdub vastav energia ΔE koskväärtusega. Kui asendada $\hat{M}_z + 2\hat{S}_z = \hat{J}_z + \hat{S}_z$, võib \bar{S}_z arvutamiseks kasutada valemit (c) ülesandes 162.

Vastus:

$$\Delta E = \frac{e\hbar}{2mc} \mathcal{H} g_{j,l,s} m_j,$$

kus

$$g_{j,l,s} = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}$$

on Landé kordaja.

195. Arvutada Landé kordaja ühe optilise elektroniga aatomi korral vahetult operaatorite $\hat{J}^2, \hat{M}^2, \hat{S}^2$ ühiste omafunktsioonide abil.

Märkus: Eelmises ülesandes defineeritud $\overline{\Delta E}$ arvutada Pauli võrrandi lahendite abil, mis on leitud ülesandes 159. Veenduda, et tulemus on sama (avaldatuna j, l, s kaudu), kui $j = l + \frac{1}{2}$ ja $j = l - \frac{1}{2}$.

196. Leida vesiniku aatomi energiatasemete lagunemine tugevas magnetväljas, kui magnetväljast tingitud täiendav

energia on suurem energia vahedest ühe multiplleti piires, kuid märksa väiksem erinevate multiplettide energiatega vahedest.

Märkus: Viimane ülesande tingimus on vajalik häiritusarvutuse õigustuseks. Esimese tingimuse kohaselt võib ka spinorbitaalset interaktsiooni lugeda häirituseks, mistõttu häiritushamiltoniaani saame kujul

$$\hat{H}' = \frac{e\hbar}{2mc} \mathcal{H} (\hat{M}_z + 2\hat{S}_z) + \frac{e^2}{2m^2c^2} \frac{1}{r^3} (\hat{M} \hat{S}).$$

(Vt. näit. ül. 187.) Häirimata olek on iseloomustatud kvantarvudega l, s, m_l, m_s . Keskvärtuse $(\overline{MS}) = M_x S_x + M_y S_y + M_z S_z$ arvutamisel tuleb silmas pidada, et antud juhul on keskvärtused spinoperaatorist ja orbitaalse momendi operaatorist arvutatavad eraldi (olekufunktsioon $\psi(\vec{r}, \sigma) = \psi(\vec{r}) \chi(\sigma)$, mistõttu $(\overline{MS}) = m_l m_s$).

Vastus:

$$\Delta E = \frac{e\hbar}{2mc} \mathcal{H} (m_l + 2m_s) + \frac{e^2 \hbar^2}{2m^2 c^2} \left(\frac{1}{r^3} \right) m_s m_l,$$

kus

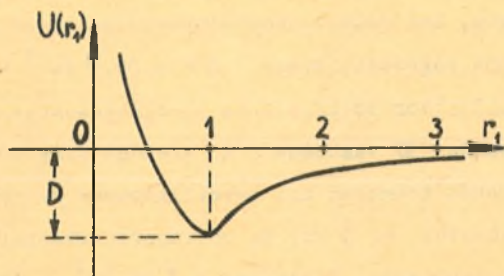
$$\left(\frac{1}{r^3} \right) = \frac{1}{n^3 (l+1)(l+\frac{1}{2})l} \left(\frac{m_l^2}{\hbar^2} \right)^3.$$

Ülesande 187 põhjal on viimane parandusliige avaldatav

$\frac{\Delta E}{l+\frac{1}{2}} m_l m_s$, kus $\Delta E = E_{n,l,j+\frac{1}{2}} - E_{n,l,j-\frac{1}{2}}$ on spinorbitaalsest interaktsioonist tingitud energiatasemete vahe antud dubletis.

197. Kaheaatomilise molekuli ostsillaator-rotatoorse energiataasemete uurimisel oletada, et molekulidevaheline potentsiaalne energia on $U(r_1) = -2 \mathcal{D} \left(\frac{1}{r_1} - \frac{1}{2r_1^2} \right)$, kus

$r_1 = \frac{\hbar}{a}$ ja R on aatomituumade kaugus (vt. joonis 10). Lei-
da energiaspekter, kui $E < 0$, ja näidata, et molekulides



Joon. 10.

tavaliselt rahuldatud tingimusel, $\gamma^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2} D \gg 1$, koos-
neb energia võnke-, rotatsiooni- ja segatermidest. Leida mo-
lekuli dissotsiatsioonienergia avaldis.

Märkus: Schrödingeri võrrand lahendada polünoommeetodil.
Saadud energia avaldis arendada eeldusel $\gamma \gg 1$ $\frac{1}{\gamma}$ astmete
järgi.

Vastus:

$$E = - \frac{\hbar^2}{2\mu a^2} \gamma^4 \left[n + \frac{1}{2} + \sqrt{\left(\ell + \frac{1}{2}\right)^2 + \gamma^2} \right]^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

μ on molekuli taandatud mass.

Kui $\gamma \gg 1$, siis

$$E = - \frac{J\omega^2}{2} + \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2}{2J} \left(\ell + \frac{1}{2}\right)^2 -$$

$$- \frac{3\hbar^2}{2J} \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{3\hbar^3}{2J^2\omega} \left(n + \frac{1}{2}\right) \left(\ell + \frac{1}{2}\right)^2 + \dots,$$

kus $\omega = \sqrt{\frac{2D}{\mu a^2}}$, $J = \mu a^2$ on molekuli inertsmoment.

$$E_{\text{din.}} = 0 - E \Big|_{\substack{n=0 \\ l=0}} = \frac{1}{2} J \omega^2 - \frac{1}{2} \hbar \omega + \frac{1}{4} \frac{\hbar^2}{J} + \frac{3}{16} \frac{\hbar^3}{J^2 \omega} + \dots$$

198. Arvutada $\mathcal{H}^1 \text{Cl}^{35}$ molekuli inertsmoment ja tuumadevaheline kaugus, kui ostsillatoor-rotatoorse spektri riba kahe naaberjoone sageduste vahe $\Delta \nu = 20,9 \text{ cm}^{-1}$.

Märkus: Ostsillatoor-rotatoorse energiatasete avaldis on antud ülesande 197 vastuses (E arendus tingimusel $\gamma \gg 1$). Üleminekud toimuvad nii ostsillatoorse kvantarvu (ülesandes 197 tähistus n) kui ka rotatoorse kvantarvu (tähistus l) muutumisega, kusjuures $\Delta l = \pm 1$. Antud ribas n_1 ja n_2 on fikseeritud, naaberjoonte rotatoorne kvantarv l erineb ühe võrra. Inertsmoment J avaldub vahetult $\Delta \nu$ kaudu, kuna kaugus molekulide vahel tasakaaluolekus (tähistus a) on leitav J ja taandatud massi μ kaudu. Antud molekuli korral $\mu = 1,61 \cdot 10^{-24} \text{ g}$.

Vastus:

$$J = 2,65 \cdot 10^{-40} \text{ gcm}^2, \quad a = 1,29 \cdot 10^{-8} \text{ cm}.$$

199. Arvutada raske vesiniku molekuli \mathcal{D}_2 dissotsiatsioonenergia, kui hariliku vesiniku molekuli \mathcal{H}_2 dissotsiatsioonenergia on $4,46 \text{ eV}$ ja nullvõnke energia ($= \frac{1}{2} \hbar \omega_0$) võrdub $0,24 \text{ eV}$.

Märkus: Kaheaatomilise molekuli dissotsiatsioonenergia avaldis on antud ülesande 197 vastuses. Ülesande andmetest on võimalik arvutada kaugus a ja potentsiaalaugu sügavus D , mis mõlemate molekulide korral on sama, kuna potentsiaali $U(r)$ kuju (joon. 10 ülesandes 197) oleneb ainult elektronkate olekust.

Vastus:

$$E_{\text{diss.}} = 4,54 \text{ eV}.$$

200. Oletades, et kaheaatomilise molekuli potentsiaalset energiat võib aproksimeerida Morse'i potentsiaaliga

$$U(r) = D \left(1 - e^{-2\beta(r-a)} \right)^2, \quad \text{kus } \xi = \frac{r-a}{a},$$

D, β, a on konstandid, leida otsillatoorse energiatasete avaldis, kui rotatoorne kvantarv $\ell = 0$, ja arvutada disotsiatsioonienergia.

Märkus: Kasutades muutujat $z = \alpha e^{-2\beta\xi}$, kus $\alpha^2 = \frac{2\mu a^2 D}{\hbar^2}$, teisendada radiaalfunktsiooni $R = \frac{\chi}{z}$ võrrand kujusse

$$z'' + \frac{1}{z} z' + \left(-\frac{s^2}{z^2} - \frac{1}{4} + \frac{n+s+\frac{1}{2}}{z} \right) \chi = 0, \quad (1)$$

kus

$$s = \sqrt{\frac{\mu a^2 (D-E)}{\hbar^2}}, \quad n+s+\frac{1}{2} = \frac{\mu a^2 D}{\alpha \beta^2 \hbar^2}.$$

Võrrand (1) on lahendatav polünoommeetodil.

Vastus:

$$E = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{\hbar^2 \omega^2}{4D} \left(n + \frac{1}{2} \right)^2; \quad \omega = \sqrt[4]{\frac{D}{2\mu a^2}}$$

$$E_{\text{diss.}} = D - \frac{\hbar \omega}{2} + \frac{\hbar^2 \omega^2}{16D}.$$

LIIISA A. KVANTMEHHAANIKA VALEMEID JA ARVUTUS-
MEETODEID.

1. Operaatorid, nende omadused, mitmesugused esitused.

Reaalsetele füüsikalistele suurustele vastavad kvant-
mehhaanikas hermiitilised operaatorid. Moodustagu $\psi_1(q)$,
 $\psi_2(q)$, . . . , $\psi_n(q)$, . . . funktsioonide hulga, mil-
lel on defineeritud operaatorid \hat{A} , \hat{B} , \hat{C} ,

Operaatorit \hat{B} nimetatakse operaatori \hat{A} kaasoperaa-
toriks ja tähistatakse $\hat{B} = \hat{A}^+$, kui mistahes ψ_i , ψ_k
korral kehtib seos

$$\int \psi_i^* \hat{B} \psi_k dq = \int (\hat{A} \psi_i)^* \psi_k dq. \quad (1)$$

Valemist (1) järeneb, et kui $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$, siis $\hat{C}^+ = \hat{B}^+ \hat{A}^+$.

Operaator on hermiitiline, kui $\hat{A} = \hat{A}^+$ ja unitaarne,
kui $\hat{A}^+ = \hat{A}^{-1}$, kus $\hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{A}\hat{A}^{-1} = I$.

Võrrandi

$$\hat{A}\psi = \alpha\psi \quad (2)$$

lahendeid nimetatakse operaatori \hat{A} omafunktsioonideks ja
parameetri α väärtusi, millede korral võrrand (2) on la-
henduv - \hat{A} omaväärtusteks.

Hermiitilise operaatori erinevatele omaväärtustele vas-
tavad omafunktsioonid on lineaarselt sõltumatud ja neist
võib moodustada ortonormeeritud (ON) süsteeme. ON-süsteemi
tingimus diskreetse omaväärtuste spektri korral on:

$$\int \psi_{\alpha_i}^*(q) \psi_{\alpha_k}(q) dq = \delta_{ik}, \quad (3a)$$

pideva spektri korral (omaväärtusi α , α' pole võimalik nummerdada) vastavalt:

$$\int \psi_{\alpha}^*(q) \psi_{\alpha'}(q) dq = \delta(\alpha - \alpha'). \quad (3b)$$

Seoste (3a, 3b) abil on arvutatavad mistahes funktsiooni $\psi(q)$ arenduse

$$\psi(q) = \sum_{\kappa} C_{\kappa} \psi_{\alpha_{\kappa}}(q) + \int C_{\alpha} \psi_{\alpha}(q) d\alpha \quad (4)$$

kordajad C_{κ} või C_{α} , millel on tõenäosuse amplituudide tähendus. S. t. kui $\psi(q)$ on normeeritud, siis $|C_{\kappa}|^2$ annab tõenäosuse ($|C_{\alpha}|^2$ vastavalt tõenäosusetiheduse), et mõõtes olekus ψ suurust A saame väärtuseks α_{κ} .

Kui operaatorid \hat{A} ja \hat{B} kommuteeruvad, s. t. kui

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0,$$

siis on neil täielik ühiste omafunktsioonide süsteem. See teoreem võimaldab keerukamate operaatorite (näit. energiaoperaatori) omafunktsioonide leidmisel kasutada lihtsamate operaatorite (näit. impulsi- või impulssmomentioperaatori) omaväärtusprobleemide lahendeid.

Füüsikalise suuruse A keskväertus \bar{A} olekus ψ on arvutatav valemist

$$\bar{A} = \int \psi^*(q) \hat{A} \psi(q) dq. \quad (5)$$

Kui operaatorid \hat{A} ja \hat{B} ei kommuteeru, s. t. kui $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$, siis rahuldavad nende ruutkeskmised hälbed nn. määramatuserelatsioone:

$$\overline{(\Delta A)^2} \overline{(\Delta B)^2} \geq \frac{|C|^2}{4}, \quad (6)$$

kus $\Delta A = \hat{A} - \bar{A}$, $\Delta B = \hat{B} - \bar{B}$.

Kui \hat{A} tähistab füüsikalise suuruse A ajalise muutumise kiirust, siis temale vastav operaator \hat{A} on arvutatav valemist

$$\hat{A} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}] + \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}, \quad (7)$$

kus \hat{H} on vaadeldava objekti Hamiltoni operaator.

Schrödingeri esituse operaator \hat{A} on seotud vastava Heisenbergi esituse operaatoriga $\hat{A}_H(t)$ järgmiselt

$$\hat{A}_H(t) = \hat{S}^\dagger(t) \hat{A} \hat{S}(t), \quad (8)$$

kus $\hat{S}(t)$ on ajast sõltuv unitaarne operaator, mis rahuldab operaatorvõrrandit

$$- \frac{\hbar}{i} \frac{d\hat{S}}{dt} = \hat{H} \hat{S}(t). \quad (9)$$

Valemitest (8) ja (9) järgneb operaatorvõrrand

$$- \frac{\hbar}{i} \frac{d\hat{A}_H}{dt} = [\hat{A}_H, \hat{H}_H], \quad (10)$$

mille integreerimine võimaldab arvutada operaatori $\hat{A}_H(t)$ kui aja funktsiooni.

Kui operaatori \hat{A} kuju q -esituses on teada, on ta arvutatav mistahes, näiteks B -esituses järgmise valemi abil

$$\hat{A}_{(B)} = \int \psi_\beta^*(q) \hat{A} \psi_\beta(q) dq, \quad (11)$$

kus $\psi_\beta(q)$ on omaväärtusprobleemi

$$\hat{B} \psi_\beta(q) = \beta \psi_\beta(q)$$

lahendid. Kui \hat{B} omaväärtuste spekter on diskreetne, defineerib valem (11) hermiitilise maatriksi (kui \hat{A} on hermiitiline).

Iga teisendus olekufunktsiooni Ψ argumentide ruumis (q -ruum) indutseerib mõnesuguse Ψ -le mõjuva operaatori.

Nihketeisendus koordinaatruumis indutseerib impulsioperaatori

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla, \quad (12)$$

pöördeteisendus impulssmomentioperaatori

$$\hat{J} = \hat{S} + [\vec{\pi} \times \hat{p}], \quad (13)$$

kus \hat{S} on koordinaatidest sõltumatu spinoperaator, mille konkreetne kuju on määratud olekufunktsiooni geomeetriliste omadustega (skaalar, vektor, kõrgemat järku tensor, spinor), $[\vec{\pi} \times \hat{p}]$ nimetatakse orbitaalse momendi operaatoriks.

Operaatori ∇ komponendid määratakse mõnesuguses ortogonaalses (üldiselt rääkides kõverjoonelis) koordinaatsüsteemis (u, v, w) järgmiselt. Kui $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$ tähistavad koordinaatjoonte u, v, w puutujasuunalisi ühikvektoreid, siis

$$\nabla = \frac{1}{h_1} \frac{\partial}{\partial u} \vec{e}_1 + \frac{1}{h_2} \frac{\partial}{\partial v} \vec{e}_2 + \frac{1}{h_3} \frac{\partial}{\partial w} \vec{e}_3. \quad (14)$$

Suurused h_1, h_2, h_3 on defineeritud kaareelemendi ruudu ds^2 avaldise kaudu:

$$ds^2 = h_1^2 du^2 + h_2^2 dv^2 + h_3^2 dw^2. \quad (15)$$

Näiteks Cartesiuse koordinaatides $u = x, v = y, w = z$

$$ds^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2, \text{ s.t. } h_1 = h_2 = h_3 = 1,$$

ja

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}; \quad \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}; \quad \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}. \quad (16)$$

Sfäärilistes koordinaatides

$$x = r \sin \vartheta \cos \varphi, \quad y = r \sin \vartheta \sin \varphi, \quad z = r \cos \vartheta;$$

$$u = r, \quad v = \vartheta, \quad w = \varphi;$$

$$ds^2 = dr^2 + r^2 d\vartheta^2 + r^2 \sin^2 \vartheta d\varphi^2,$$

millest

$$h_u = 1, \quad h_v = r; \quad h_w = r \sin \vartheta$$

ja

$$\hat{p}_r = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r}; \quad \hat{p}_\vartheta = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta}; \quad \hat{p}_\varphi = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (17)$$

Analoogiliselt silinderkoordinaatides (ρ, φ, z) , kus

$$x = \rho \cos \varphi, \quad y = \rho \sin \varphi, \quad \rho^2 = x^2 + y^2;$$

$$\hat{p}_\rho = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \rho}; \quad \hat{p}_\varphi = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi}; \quad \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}. \quad (18)$$

2. Schrödingeri võrrand mitterelativistliku

osakese jaoks.

Schrödingeri võrrandis

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi \quad (19)$$

esinev Hamiltoni operaator \hat{H} avaldub mitterelativistliku

osakese korral kujul

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\vec{r}, t), \quad (20)$$

kui osake viibib konservatiivsete tungide $\vec{F} = -\text{grad } U$ väljas;

kujul

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e \phi, \quad (21)$$

kui osake spiniga 0 ja laenguga e viibib elektromagnetväljas 4-potentsiaaliga (\vec{A}, ϕ) ;

kujul

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e \phi - \frac{e \hbar}{2mc} (\vec{\sigma} \cdot \vec{\mathcal{H}}) \quad (22)$$

elektroni jaoks spinoperaatoriga $\frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$ ja laenguga e elektromagnetväljas 4-potentsiaaliga (\vec{A}, ϕ) ja magnetvälja tugevusega $\vec{\mathcal{H}}$. Valem (22) annab Pauli võrrandi Hamiltoni operaatori, kusjuures vektori $\vec{\sigma}$ komponentideks on Pauli spinmaatriksid:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (23)$$

Võrrandi (19) lahendeid võib otsida arendusena statsionaarsete olekufunktsioonide järgi, üldjuhul ajast sõltuvate kordajatega, s. t. kujul:

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_{\kappa} C_{\kappa}(t) \varphi_{E_{\kappa}}(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_{\kappa} t} + \int C_E(t) \varphi_E(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} dE, \quad (24)$$

kus funktsioonid $\varphi_{E_{\kappa}}(\vec{r})$ (vastavalt $\varphi_E(\vec{r})$) on diskreetse (vastavalt pideva) energiaspektri omafunktsioonid:

$$\hat{H}_0 \varphi_{E_{\kappa}} = E_{\kappa} \varphi_{E_{\kappa}}. \quad (25)$$

Operaator \hat{H}_0 on operaatori \hat{H} ajast sõltumatu osa:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'(t). \quad (26)$$

Kui \hat{H} ei sõltu ajast, siis $\hat{H} = \hat{H}_0$ ja arenduse (24) kordajad C on konstandid, mis määratakse algtingimusest $\psi(\vec{r}, t=0) = \psi_0(\vec{r})$, kasutades funktsioonide $\varphi_E(\vec{r})$

ON tingimusi (valemid (3a, 3b)).

Kui H sisaldab ka ajast sõltuvat osa, määratakse kordajad C võrranditest

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{dC_{\kappa}}{dt} = \sum_{\kappa'} H'_{\kappa\kappa'} C_{\kappa'}(t) e^{i\omega_{\kappa\kappa'}t} \quad (27a)$$

või

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{dC_E}{dt} = \int H'_{EE'} C_{E'}(t) e^{i\omega_{EE'}t} dE', \quad (27b)$$

kus

$$H'_{\kappa\kappa'} = \int \varphi_{E\kappa}^* \hat{H}' \varphi_{E\kappa'} d(\vec{r}); \quad H'_{EE'} = \int \varphi_E^* \hat{H}' \varphi_{E'} d(\vec{r});$$

$$\omega_{\kappa\kappa'} = \frac{1}{\hbar} (E_{\kappa} - E_{\kappa'}); \quad \omega_{EE'} = \frac{1}{\hbar} (E - E')$$

koos vastava algtingimusega

$$\psi(\vec{r}, t=0) = \psi_0(\vec{r}).$$

Schrödingeri võrrandi (19. 20) lahenditest võib moodustada tõenäosuse tiheduse

$$\rho = |\psi|^2 \quad (28)$$

ja tõenäosuse tiheduse voo

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\nabla\psi^* \cdot \psi - \psi^* \nabla\psi) \quad (29)$$

avaldised, mis (19) tõttu rahuldavad pidevusevõrrandit

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \vec{j} = 0. \quad (30)$$

Kui e tähistab osakese laengut ja m massi, siis $e\rho$ on laengutihedus, $e\vec{j}$ - osakese poolt tekitatud elektrivoolutihedus, $m\rho$ - masstihedus ja $m\vec{j}$ - impulsihdedus.

Kui seosega

$$\vec{j} = \rho \vec{v} \quad (31)$$

defineerida tõenäosusevoo kiirus \vec{v} , on mitterelativistliku võrrandi kasutamine õigustatud siis, kui $|\vec{v}| \ll c$, kus c on valgusekiirus.

Avaldist (29) kasutatakse osakeste voo arvutamiseks potentsiaalbarjäärade läbimise ja nendelt peegeldumise koefitsientide määramisel, samuti osakeste voo arvutamisel hajutamisprobleemides.

Valemi (29) abil võib näiteks arvutada aatomielektroni liikumisest tingitud elektrivoolutiheduse ja sellele vastava polaarteljesuunalise magnetvälja.

$$d\mathcal{H}_z = \frac{dJ}{nc} 2\pi r \sin^2\theta; \quad dJ = e j_\varphi r d\theta dr, \quad (32)$$

kus

$$j_\varphi = \frac{ik}{2m} \frac{1}{r \sin\theta} \left(\frac{\partial\psi^*}{\partial\varphi} \psi - \psi^* \frac{\partial\psi}{\partial\varphi} \right). \quad (33)$$

($j_r = j_\theta = 0$ tsentraalsümmeetrilise välja korral).

Ajast sõltumatu Schrödingeri võrrandi (25) lahendid peavad rahuldama teatud lisatingimusi.

1) Ühesuse tingimus. Kui ψ sõltub mõnesugusest tsüklilisest koordinaadist, näiteks polaarnurgast φ , siis $\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$.

2) Funktsiooni ψ ja tema esimest järku tuletiste pidevus. Kui funktsioon $\mathcal{U}(\vec{r})$ on tükiti pidev, näiteks $\mathcal{U}(\vec{r}) = f_1(x)$, kui $-\infty < x \leq a$; $\mathcal{U}(\vec{r}) = f_2(x)$, kui $a \leq x < +\infty$, lahendatakse Schrödingeri võrrand eraldi piirkonnas $x < a$ ($\psi = \psi_1$) ja piirkonnas $x > a$ ($\psi = \psi_2$) ning esitatakse lahenditele ψ_1 ja ψ_2 järgmised nõuded:

$$\psi_1(a) = \psi_2(a); \quad \left. \frac{\partial \psi_1}{\partial x} \right|_{x=a} = \left. \frac{\partial \psi_2}{\partial x} \right|_{x=a}.$$

Kui

$$u(\vec{r}) \Big|_{r \rightarrow a} \rightarrow +\infty, \text{ kui } r \rightarrow a,$$

siis on punktis $x = a$ ainsaks nõudeks $\psi(a) = 0$.

3) Funktsiooni ψ lõplikkus. Selleks, et ψ tõenäosuslik interpretatsioon omaks mõtet, peab alati kehtima lõplikkuse tingimus lõpmatuse punkti ümbruses: $\lim_{r \rightarrow \infty} |\psi(\vec{r})| < N$, kus N on mõnesugune lõplik arv. Mistahes lõpliku punkti P ümbruses peavad funktsioonid $\psi(\vec{r})$ rahuldama järgmisi regulaarsuse nõudeid:

$$\lim_{r \rightarrow 0} |\psi(r)|^2 r^3 = 0, \quad (A)$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} \left(\frac{\partial \psi_1^*}{\partial r} \psi_2 - \psi_1^* \frac{\partial \psi_2}{\partial r} \right) r^2 = 0, \quad (B)$$

kus $r = \sqrt{(\vec{r} - \vec{r}_p)^2}$. Valemis (B) on ψ_1 ja ψ_2 kahele erinevale omaväärtusele vastavad omafunktsioonid.

Võrrand (25) on täpselt lahenduv ainult lihtsamatel juhtudel. Kui võimalik, tuleb lahendit otsida koordinaatides, kus u sõltub ainult ühest muutujast või on esitatav summana, mille iga liige sõltub ainult ühest muutujast.

Kui $U(\vec{r}) = U(x)$, otsime ψ kujul $\psi(x, y, z) = X(x) Y(y) Z(z)$, kus Y ja Z rahuldavad vaba osakese võrrandit,

$$\frac{d^2 y}{dy^2} + \alpha_1^2 y = 0; \quad \frac{d^2 z}{dz^2} + \alpha_2^2 z = 0 \quad (34)$$

ja $X(x)$ rahuldab ühedimensionaalse liikumise võrrandit

$$\frac{d^2 x}{dx^2} + (\varepsilon - u(x)) x = 0, \quad (35)$$

kus

$$u(x) = \frac{2m}{\hbar^2} U(x); \quad \mathcal{E} + \mathcal{E}_1^2 + \mathcal{E}_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E.$$

Kerasümmeetrilise potentsiaali $U(\vec{r}) = U(r)$ korral on sobiv kasutada sfäärilisi koordinaate (r, ϑ, φ) ja lahendit otsida kujul $\psi(r, \vartheta, \varphi) = R_\ell Y_\ell^m(\vartheta, \varphi) \cdot R_\ell(r)$ rahuldab võrrandit

$$\frac{d^2 R_\ell}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_\ell}{dr} + \left[\mathcal{E} - U(r) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R_\ell = 0, \quad (36)$$

kus $\mathcal{E} = \frac{2m}{\hbar^2} E.$

Asendusega $R_\ell \rightarrow \frac{\chi_\ell}{r}$ saadakse funktsioonile χ_ℓ ühedimensionaalse liikumise võrrandi kuju:

$$\frac{d^2 \chi_\ell}{dr^2} + \left[\mathcal{E} - U(r) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] \chi_\ell = 0; \quad (36')$$

$Y_\ell^m(\vartheta, \varphi)$ on kerapinna funktsioonid.

Silindersümmeetrilise potentsiaali korral, $U(\vec{r}) = U(\rho)$, on sobiv kasutada silinderkoordinaate $x = \rho \cos \varphi$, $y = \rho \sin \varphi$, z ja lahendit otsida kujus

$$\psi(\rho, \varphi, z) = \xi_m(\rho) e^{im\varphi} Z(z), \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots,$$

kus $Z(z)$ on vaba osakese võrrandi lahend ja $\xi_m(\rho)$ rahuldab võrrandit

$$\frac{d^2 \xi_m}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d\xi_m}{d\rho} + \left[\mathcal{E} - U(\rho) - \frac{m^2}{\rho^2} \right] \xi_m = 0. \quad (37)$$

Asendusega

$$\xi_m \rightarrow \frac{\chi_m(\rho)}{\rho^{1/2}}$$

saadakse funktsioonile χ_m ühedimensionaalse liikumise

võrrand

$$\frac{d^2 \chi_m}{d\rho^2} + \left[\varepsilon - u(\rho) - \frac{m^2 - \frac{1}{4}}{\rho^2} \right] \chi_m = 0. \quad (37')$$

Asendusega $R_e \rightarrow n^{-\frac{1}{2}} \eta_e$ saadakse tsentraalsümmeetrilise välja korral funktsioonile η_e võrrandiga (37) analoogiline kuju

$$\frac{d^2 \eta_e}{dn^2} + \frac{1}{n} \frac{d\eta_e}{dn} + \left[\varepsilon - u(n) - \frac{(l + \frac{1}{2})^2}{n^2} \right] \eta_e = 0. \quad (36'')$$

Mõnede erikujuliste potentsiaalide korral (näiteks $U = \text{konst.}$) on võrrandi (37) (resp. (36'')) lahendid otsekohe avaldatavad Besseli funktsioonide kaudu. Seda võib arvestada ka asümptootiliste lahendite otsimisel (näiteks pörkeprobleemides), kui $U(n) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$.

Kuloniilist tüüpi potentsiaali korral, $U \sim \frac{1}{n}$, samuti ka siis, kui sellele lisandub homogeense elektrivälja potentsiaal, $U' \sim z$, (näiteks Starki efekt vesinikusarnasel aatomil), on mõnikord sobiv kasutada paraboolseid koordinaate ξ, η, φ , $0 \leq \xi, \eta < \infty$, kus $x = \sqrt{\xi\eta} \cos \varphi$, $y = \sqrt{\xi\eta} \sin \varphi$, $z = \frac{1}{2}(\xi - \eta)$, $r = \frac{1}{2}(\xi + \eta)$,
$$\Delta = \frac{4}{\xi + \eta} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \right] + \frac{1}{\xi\eta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}.$$

Schrödingeri võrrandi (25) lahendit võib siis otsida kujns

$$\psi = f_1(\xi) f_2(\eta) e^{im\varphi}; \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots,$$

kus funktsioonid f_1 ja f_2 rahuldavad (37)-tüüpi võrrandeid.

Pidevate potentsiaalidega võrrandite (35), (36), (37)

lahendamisel lõplikus piirkonnas tuleb alati silmas pidada tingimust $\psi = 0$ määramispiirkonna äärel ja regulaarsusetingimusi (A), (B) määramispiirkonna sees.

Lõpmatu piirkonna korral tuleb arvestada kõiki punktis 3) loetletud nõudeid.

$$\text{Potentsiaalide } u = A + \frac{B}{x} + \frac{C}{x^2} \text{ ja } u = A' + B'x^2$$

(mitte $u \sim x$!) või sobiva sõltumatu muutuja valikuga nendeks taandatavate potentsiaalide korral võib diskreetse energiaspektri leidmiseks lõpmatus liikumispiirkonnas võrrandi (35) (vastavalt (36'), (37')) lahendamisel kasutada nn. polünoommeetodit. Selleks leitakse kõigepealt asümptootiline lahend $\chi_{x \rightarrow \infty} = \chi_{as}$, mis peab täitma tingimust $\chi_{as} \rightarrow 0$ $x \rightarrow \infty$. χ_{as} rahuldab võrrandit tüüpi

$$\frac{d^2 \chi_{as}}{dx^2} + \varepsilon \chi_{as} = 0, \text{ kui } u(x) \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} 0, \quad (38a)$$

või

$$\frac{d^2 \chi_{as}}{dx^2} - u(x) \chi_{as} = 0, \text{ kui } u(x) \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} 0. \quad (38b)$$

Lahend χ esitatakse kujul:

$$\chi(x) = \sum_{k=0}^n a_k x^{s+k} \chi_{as}, \quad a_0 \neq 0, \quad (39)$$

kus karakteristik astmenäitaja s määratakse funktsiooni χ (vastavalt funktsioonide $R(r)$ või $\xi(\rho)$) regulaarsuse nõudest, kui $x \rightarrow 0$ ($r \rightarrow 0$ või $\rho \rightarrow 0$).

Võrrandist χ jaoks leitakse rekurrentsed seosed valemis (39) esineva astmerea kordajate vahel. Rea lõplikkuse tingimus ($a_k = 0$, kui $k = n + 1, n + 2, \dots$) määrab võimalikud energiaväärtused. (Kordajad a_k sõltuvad energiast ε kui võrrandi parameetrist).

Sageli tuleb energia omaväärtusprobleemi lahendamisel kasutada lähendusmeetodeid.

3. Schrödingeri võrrandi ligikaudse lahendamise meetodeid.

a) Häiritusarvutuse meetod.

Kui Hamiltoni operaator on esitatav kujul

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \varepsilon \hat{H}', \quad (40)$$

kus $\varepsilon \ll 1$ ja \hat{H}_0 omaväärtusprobleem on täpselt lahendatav:

$$\hat{H}_0 \psi_k^{(0)} = E_k^{(0)} \psi_k^{(0)}, \quad (41)$$

võib võrrandi

$$\hat{H} \psi_k = E_k \psi_k \quad (42)$$

lahendeid otsida kujul:

$$\left. \begin{aligned} E_k &= E_k^{(0)} + \varepsilon E_k^{(1)} + \varepsilon^2 E_k^{(2)} + \dots, \\ \psi_k &= \psi_k^{(0)} + \varepsilon \psi_k^{(1)} + \varepsilon^2 \psi_k^{(2)} + \dots \end{aligned} \right\} \quad (43)$$

Kui avaldised (43) paigutada võrrandisse (42) ja seejärel võrrutada samade ε astmete kordajad, saame järk-järguliselt lahendatava süsteemi:

$$\left. \begin{aligned} (\hat{H}_0 - E_k^{(0)}) \psi_k^{(0)} &= 0, \\ (\hat{H}_0 - E_k^{(0)}) \psi_k^{(1)} &= (E_k^{(1)} - \hat{H}') \psi_k^{(0)}, \\ (\hat{H}_0 - E_k^{(0)}) \psi_k^{(2)} &= (E_k^{(2)} - \hat{H}') \psi_k^{(1)} + E_k^{(2)} \psi_k^{(0)}, \\ \dots &\dots \end{aligned} \right\} \quad (44)$$

Tundmatud funktsioonid $\psi_k^{(1)}$, $\psi_k^{(2)}$, ... arendatakse

täieliku ON-süsteemi moodustavate funktsioonide $\psi_{\kappa}^{(0)}$ jär-
gi:

$$\psi_{\kappa}^{(1)} = \sum_S C_{\kappa S}^{(1)} \psi_S^{(0)} ; \psi_{\kappa}^{(2)} = \sum_S C_{\kappa S}^{(2)} \psi_S^{(0)}. \quad (45)$$

Et leida süsteemist (44) parandusliikmeid k -ndale ener-
giatasemele, korrutame vastavat järku võrrandi funktsiooniga
 $\psi_{\kappa}^{(0)*}$ ja integreerime üle kogu määramispiirkonna, pidades
silmas ON tingimusi. Selleks, et leida kordajaid $C_{\kappa S}^{(1)}$,
 $C_{\kappa S}^{(2)}$, ..., korrutame võrrandit funktsiooniga $\psi_n^{(0)*}$,
 $n \neq \kappa$, ja integreerime.

Kui operaatori \hat{H}_0 omaväärtuste hulgas ei ole kordseid
(mittekõdunud juht), saame k -ndale energiatasemele järgmise-
kujulised parandusliikmed

$$E_{\kappa}^{(1)} = H'_{\kappa\kappa} ; E_{\kappa}^{(2)} = \sum_n' \frac{|H'_{n\kappa}|^2}{E_{\kappa}^{(0)} - E_n^{(0)}} \quad (46)$$

kus

$$H'_{\kappa n} = \int \psi_{\kappa}^{(0)*} \hat{H}' \psi_n^{(0)} (d\vec{r}).$$

Valemid (46) on kehtivad, kui $|H'_{\kappa n}| \lesssim |E_{\kappa}^{(0)} - E_n^{(0)}|$.

Kui \hat{H}_0 omaväärtuste hulgas on kordseid (kõdunud juht),
s. t. funktsioonid $\psi_{\kappa_1}^{(0)}$, $\psi_{\kappa_2}^{(0)}$, ..., $\psi_{\kappa_n}^{(0)}$ rahuldavad
võrrandit (41) ühe ja sama omaväärtusega $E_{\kappa}^{(0)}$, arvuta-
takse parandusliikmed k -ndale energiatasemele sekulaarvõrran-
ditest

$$\left| H'_{nn'} - E_{\kappa}^{(1)} \delta_{nn'} \right| = 0 ; \left| \sum_p' \frac{H'_{np} H'_{pn'}}{E_n^{(0)} - E_p^{(0)}} - E_{\kappa}^{(2)} \delta_{nn'} \right| = 0, \quad (47)$$

kus $n, n' = \kappa_1, \dots, \kappa_n$; $p \neq \kappa_i$ ($1 \leq i \leq n$).

Võrrandite (47) vasakud pooled on r -järku determinandid.
Seega on parandusliikmed $E_{\kappa}^{(1)}$, $E_{\kappa}^{(2)}$ jne. kõdunud juhul

arvutatavad r -astme algebraalitest võrranditest, mis üldiselt rääkides viitab kõdumise kõrvaldumisele kõrgemates lähendustes.

b) W K B e. kvaasiklassikaline lähendusmeetod.

WKB meetod (tuletatud nimedest Wentzel, Kramers, Brillouin) on rakendatav juhul, kui Schrödingeri võrrand muutujate eraldamisel taandub harilikuks diferentsiaalvõrrandiks (ühedimensionaalse liikumise võrrand) ja kui seejuures küllalt kaugel klassikaliseest pöördepunktist (punkt, kus klassikalise osakese impulss saab nulliks) muutub osakese de Broglie lainepikkus aeglaselt punktist punkti.

Kooskõlas ühedimensionaalse liikumise võrrandiga (vt. valemid (35), (36'), (37')) oletame, et energia omaväärtusprobleemile saame anda kuju

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + Q^2(x)\psi = 0, \quad (48)$$

kus

$$Q^2(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(x)). \quad (49)$$

Võrrandi (48) lahendi esitame nn. kvaasiklassikalise lainefunktsiooni kujul

$$\psi(x) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} S(x)\right] \quad (50)$$

ning arendame funktsiooni $S(x)$ \hbar astmete järgi:

$$S = S_0 + \hbar S_1 + \dots \quad (51)$$

Paigutame avaldised (50, 51) võrrandisse (48) ning võrrutame iga \hbar astme juurde kuuluva kordaja nulliga, siis saame võrrandsüsteemi

$$\ddot{\psi} + \frac{\dot{Q}}{Q} \dot{\psi} + \psi = 0, \quad (48')$$

$$\ddot{W} + \frac{\dot{Q}}{Q} \dot{W} + \left[1 - \frac{1}{4} \frac{\dot{Q}^2}{Q^2} + \frac{1}{2} \frac{\ddot{Q}}{Q} \right] W = 0. \quad (55')$$

Kui oletada, et potentsiaalne energia on x_0 lähedal arendatav $x - x_0$ astmete järgi, saame $Q^2 \sim x - x_0$ ja $\mu \sim (x - x_0)^{3/2}$ või $Q \sim \mu^{1/3}$, mistõttu pöördepunkti $\mu = 0$ lähedal võrrandid (48'), (55') omandavad kuju

$$\ddot{\psi} + \frac{1}{3\mu} \dot{\psi} + \psi = 0, \quad (48'')$$

$$\ddot{W} + \frac{1}{3\mu} \dot{W} + \left(1 - \frac{5}{36\mu^2} \right) W = 0. \quad (55'')$$

Kui defineerime funktsiooni $\chi(\mu)$, mille võrrandi vasak pool erineb (55'') vasakust poolest liikme $+\frac{5}{36\mu^2} \chi(\mu)$ poolest, s. t.

$$\ddot{\chi} + \frac{\dot{Q}}{Q} \dot{\chi} + \left[1 + \frac{5}{36\mu^2} - \frac{1}{4} \frac{\dot{Q}^2}{Q^2} + \frac{1}{2} \frac{\ddot{Q}}{Q} \right] \chi = 0, \quad (56)$$

rahuldab χ pöördepunktis täpset võrrandit, kaugel käänupunktist aga, $\frac{1}{\mu^2} \rightarrow 0$, ühtib lahend W -ga. Asendus $\chi(\mu) = Q^{-1/2} \mu^{1/2} \varphi(\mu)$ viib Besseli võrrandile

$$\ddot{\varphi} + \frac{1}{\mu} \dot{\varphi} + \left(1 - \frac{1}{9\mu^2} \right) \varphi = 0. \quad (57)$$

Seega on (56) üldlahendiks

$$\chi(\mu) = Q^{-1/2} \mu^{1/2} \left[a J_{1/3}(\mu) + b J_{-1/3}(\mu) \right]. \quad (58)$$

Arvestades saadud tulemust ning Besseli funktsioonide asümptootilisi avaldise:

$$J_{\pm \frac{1}{3}}(\mu) \xrightarrow{\mu \rightarrow 0} \frac{(\frac{1}{2}\mu)^{\pm \frac{1}{3}}}{\Gamma(1 \pm \frac{1}{3})}, \quad (59)$$

$$J_{\pm \frac{1}{3}}(\mu) \xrightarrow{\mu \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{2}\sqrt{\mu}\right)^{-\frac{1}{2}} \cos\left(\mu \mp \frac{\pi}{6} - \frac{\pi}{4}\right),$$

$$I_{\pm \frac{1}{3}}(\mu) \xrightarrow{|\mu| \rightarrow 0} \frac{(\frac{1}{2}|\mu|)^{\pm \frac{1}{3}}}{\Gamma(1 \pm \frac{1}{3})},$$

$$I_{\pm \frac{1}{3}}(\mu) \xrightarrow{|\mu| \rightarrow \infty} (2\sqrt{|\mu|})^{-\frac{1}{2}} \left[e^{|\mu|} + e^{-|\mu|} e^{-\left(\frac{1}{2} \pm \frac{1}{3}\right)i\pi} \right],$$

kus

$$I_{\pm \frac{1}{3}}(|\mu|) = (i)^{\mp \frac{1}{3}} y_{\pm \frac{1}{3}}(i|\mu|),$$

võime leida piirkonnas $Q^2 > 0$ ja $Q^2 < 0$ lahendid χ_+ ja χ_- vastavalt, nii et on rahuldatud pidevusetingimused pöördepunktis:

$$\chi_+|_{x=x_0} = \chi_-|_{x=x_0}, \quad (60)$$

$$\frac{d\chi_+}{dx}|_{x=x_0} = \frac{d\chi_-}{dx}|_{x=x_0},$$

kuna pöördepunkti kaugel omandavad χ_+ ja χ_- kvaasiklassikaliste lainefunktsioonide kuju (53a, b). Funktsioonide ψ_{\pm} ja χ_{\pm} võrdlus võimaldab täpsustada valemites (53a, b) esinevaid konstante ning saada 2 sõltumatut erilahendit, mis rahuldavad lõplikkuse ja pidevuse nõudeid.

1) Kui klassikaliselt lubatud piirkond $Q^2 > 0$ asub piirkonnas $x > x_0$, siis on sõltumatutel erilahenditel kuju

$$\psi_1(x) = \begin{cases} C|Q|^{-\frac{1}{2}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} |Q| dx\right], & x < x_0, \\ 2C|Q|^{-\frac{1}{2}} \cos\left[\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} Q dx - \frac{\pi}{4}\right], & x > x_0; \end{cases} \quad (61_1)$$

$$\psi_2(x) = \begin{cases} B|Q|^{-\frac{1}{2}} \exp\left[\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} |Q| dx\right], & x < x_0, \\ BQ^{-\frac{1}{2}} \cos\left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x Q dx + \frac{\pi}{4}\right], & x > x_0. \end{cases} \quad (61_2)$$

2) Kui lubatud piirkond on $x < x_0$, siis

$$\psi_1'(x) = \begin{cases} C'|Q|^{-\frac{1}{2}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} |Q| dx\right], & x > x_0, \\ 2C'Q^{-\frac{1}{2}} \cos\left[\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} Q dx - \frac{\pi}{4}\right], & x < x_0; \end{cases} \quad (62_1)$$

$$\psi_2'(x) = \begin{cases} B'|Q|^{-\frac{1}{2}} \exp\left[\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} |Q| dx\right], & x > x_0, \\ B'Q^{-\frac{1}{2}} \cos\left[\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} Q dx + \frac{\pi}{4}\right], & x < x_0. \end{cases} \quad (62_2)$$

Kui punkti $x = x_0$ läbimist takistab lõpmata kõrge potentsiaalbarjäär, tuleb lubatud piirkonna vastavale lahendile seada täiendav tingimus $\psi(x_0) = 0$, mis määrab lahendi faasi.

Näiteks, kui lubatud piirkond on $x < x_0$, saame selles piirkonnas funktsioonide ψ_1' ja ψ_2' asemel

$$\psi(x) = A Q^{-\frac{1}{2}} \sin\left[\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} Q dx\right], \quad x < x_0. \quad (63)$$

Kui osake liigub meelevaldse kujuga potentsiaalalagus, nii et tal on kaks pöördepunkti $x_0 \leq x \leq x_1$, siis peavad funktsioonid ψ_1 ja ψ_1' selles piirkonnas kokku lange-
ma, millest järgneb kvaasiklassikaline kvanttingimus (Bohri kvanttingimus):

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^{x_1} Q dx - \frac{\pi}{2} = n\pi; \quad c' = (-1)^n c, \quad (64)$$

või, arvestades et $\int_{x_0}^{x_1} Q dx = \frac{1}{2} \oint Q dx$,

$$\oint Q dx = 2\pi \hbar \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (64')$$

kus n on täisarv.

Tunneleefekti arvutamisel WKB lähenduses, kui klassikalises mõttes keelatud piirkond on $x_0 \leq x \leq x_1$ ja osakeste voog liigub x -telje positiivses suunas, tuleb piirkonnas $x > x_1$ moodustada ψ_1 ja ψ_2 niisugune lineaarkombinatsioon, mis küllalt kaugel punktist x_1 ($Q \approx \text{const.}$) vastaks tasapinnalisele, x -telje positiivses suunas levivale lainele. Täpselt sama kombinatsiooni piirkonnas $x_0 < x < x_1$ jätkatakse seejärel pidevalt piirkonda $x < x_0$ (lahendid ψ_1' ja ψ_2'), kus lahend avaldub pealelangeva ja peegeldunud laine summa kujul.

Pealelangevale lainele vastava voo j_1 ja läbinud lainele (piirkond $x > x_1$) vastava voo j_2 saame arvutada valemist (29). Suhe $j_1/j_2 = \mathcal{D}$ defineerib barjääri läbitavuse koefitsiendi. Kvaasiklassikalises lähenduses avaldub see kujul:

$$\mathcal{D} = \frac{\exp\left[-\frac{2}{\hbar} \int_{x_0}^{x_1} |Q| dx\right]}{\left\{1 + \frac{1}{4} \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \int_{x_0}^{x_1} |Q| dx\right]\right\}^2} \quad (65)$$

või laia barjääri korral ($\exp\left[-\frac{2}{\hbar} \int_{x_0}^{x_1} |Q| dx\right] \ll 1$)

$$\mathcal{D} = \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \int_{x_0}^{x_1} Q dx\right]. \quad (65')$$

c) Variatsioonarvutuse meetodid.

Omaväärtusvõrrand (25) on tuletatav järgmisekujulisest variatsioonarvutuse ülesandest: Määrata funktsioon ψ ja parameeter E nii, et integraali $J = \int \psi^* (\hat{H} - E) \psi (d\vec{r})$ väärtus oleks minimaalne, s. t.

$$\delta \int \psi^* (\hat{H} - E) \psi (d\vec{r}) = 0. \quad (66)$$

Tingimuse (66) annab energia madalaima nivoo ja sellele vastava omafunktsiooni. Järgmiste nivoode leidmiseks tuleb võrdlusfunktsioonide hulka piirata lisatingimustega, et kõik erinevatele energiatele vastavad olekufunktsioonid oleksid omavahel ortogonaalsed.

Variatsioonarvutuse ülesanne (66) taandub hariliku ekstreemumi leidmise ülesandeks, kui võrdlusfunktsioonid valida sõltuvaina mõnesugustest parameetritest c_1, c_2, \dots, c_n . Parameetrite arvu määrab soovitud täpsus.

Omaväärtusprobleemi võime esitada kujul

$$E = \int \psi^* \hat{H} \psi (d\vec{r}), \quad (67)$$

kui ψ on normeeritud.

Siis energia miinimumi väärtavad tingimused

$$\frac{\partial E}{\partial c_1} = 0, \dots, \frac{\partial E}{\partial c_n} = 0 \quad (68)$$

koos ψ normeerimistingimusega $\int |\psi|^2 (d\vec{r}) = 1$ ning ortogonaalsusetingimustega ergutatud tasemete korral.

Lähtefunktsioonide sobiv valik võimaldab parameetrite arvu vähendada. Sageli piirduakse ühest parameetrist sõltuva funktsiooniga, mida võib vaadelda võrdlusfunktsioonide ja da esimese liikmena. Näiteks aatomite energiatasemete määra-

misel kasutatakse tavaliselt vesiniku aatomi omafunktsioone, kus varieeritavateks parameetriteks on nn. efektiivsed laengud.

Variatsioonarvutuse eri meetoditest on tuntuimad Ritzi meetod, mastaabi varieerimise meetod ja nende kombinatsioonid.

Ritzi meetodi kohaselt arendatakse otsitav funktsioon ritta mõnesuguse täieliku funktsioonide süsteemi järgi, kusjuures praktikas piirduakse ainult teatud lõpliku arvu liikmetega, s. t.

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\kappa=1}^n c_{\kappa} f_{\kappa}(\vec{r}). \quad (69)$$

Variatsiooniparameetriteks on siin arenduse kordajad c_{κ} . Kuna funktsioonid $f_{\kappa}(\vec{r})$ ei tarvitse olla ortonormeeritud, saame omaväärtusprobleemile kuju

$$E \sum_{i,\kappa=1}^n c_i^* c_{\kappa} S_{i\kappa} = \sum_{i,\kappa=1}^n c_i^* c_{\kappa} H_{i\kappa}, \quad (70)$$

kus

$$H_{i\kappa} = \int f_i^* \hat{H} f_{\kappa} (d\vec{r}), \quad S_{i\kappa} = \int f_i^* f_{\kappa} (d\vec{r}).$$

Miinimumitingimuseks on

$$\frac{\partial E}{\partial c_i} = 0, \quad \frac{\partial E}{\partial c_i^*} = 0, \quad (i = 1, \dots, n). \quad (71)$$

Kasutades neist teist (esimene annab teise suhtes kaaskomplekssed avaldised), saame koefitsientidele c_{κ} homogeense süsteemi

$$\sum_{\kappa=1}^n c_{\kappa} (H_{i\kappa} - S_{i\kappa} E) = 0, \quad (72)$$

mille lahenduvustingimusest

$$\begin{vmatrix} H_{11} - S_{11} E & H_{12} - S_{12} E & \dots & H_{1n} - S_{1n} E \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ H_{n1} - S_{n1} E & H_{n2} - S_{n2} E & \dots & H_{nn} - S_{nn} E \end{vmatrix} = 0. \quad (73)$$

määratakse energia E väärtusel kui n -astme algebralise võrrandi (73) lahendid.

Mastaabi varieerimise meetodit kasutatakse aatomite energiatasemete arvutamisel, kui elektronide interaktsiooni võib lugeda häirituseks. N -elektroonse aatomi Hamiltoni operaatoril on kuju (tuuma liikumist ei arvesta):

$$\hat{H} = \hat{T} + U + V, \quad (74)$$

kus

$$\begin{aligned} \hat{T} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \Delta_{(i)}, \\ U &= -\sum_{i=1}^N \frac{Ze^2}{|\vec{r}_i|}, \\ V &= \frac{1}{2} \sum_{i,k=1}^N \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_k|}. \end{aligned} \quad (75)$$

Avaldised \hat{T} , U , V rahuldavad tingimusi

$$\begin{aligned} \hat{T} \left(\frac{\vec{r}}{\lambda} \right) &= \lambda^2 \hat{T}(\vec{r}), \quad U \left(\frac{\vec{r}}{\lambda} \right) = \lambda U(\vec{r}), \\ V \left(\frac{\vec{r}}{\lambda} \right) &= \lambda V(\vec{r}). \end{aligned} \quad (76)$$

Siin tähistab \vec{r} elektronide koordinaatide kompleksi $(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$.

Oletades, et hamiltoniaanil $\hat{H}_0 = \hat{T} + U$ on põhiolekus omaväärtus E_0 ja omafunktsioon $\psi_0(\vec{r})$, otsime hamiltoniaani (74) omaväärtusprobleemi lahendit (põhiolekus) kujul

$$\psi = \lambda^{\frac{3N}{2}} \psi_0(\lambda \vec{n}). \quad (77)$$

λ vaatleme nüüd kui variatsiooniparameetrit, mis määratakse avaldise

$$\begin{aligned} E &= \int \psi^*(\vec{n}) \left[\hat{T}(\vec{n}) + U(\vec{n}) + V(\vec{n}) \right] \psi(\vec{n}) (d\vec{n}) = \\ &= \int \psi_0^*(\vec{n}) \left[\hat{T}\left(\frac{\vec{n}}{\lambda}\right) + U\left(\frac{\vec{n}}{\lambda}\right) + V\left(\frac{\vec{n}}{\lambda}\right) \right] \psi_0(\vec{n}) (d\vec{n}) \quad (78) \end{aligned}$$

minimumitingimusest.

4. Mittestatsionaarsete olekutega seotud lähendusmeetodeid.

a) Diraci häiritusarvutus üldjuhul.

Vaadeldava meetodi idee kohaselt oletame, et kõik võrrandites (27) esinevad maatrikselemendid rahuldavad tingimust $|H_{\kappa\kappa'}| \ll 1$, mistõttu otsitavad funktsioonid $C_{\kappa}(t)$ võib esitada kujul

$$C_{\kappa}(t) = C_{\kappa}^{(0)}(t) + C_{\kappa}^{(1)}(t) + \dots, \quad (79)$$

kus

$$|C_{\kappa}^{(n+1)}(t)| \ll |C_{\kappa}^{(n)}(t)|, \quad n = 0, 1, \dots$$

Siis taanduvad võrrandid (27) järk-järguliselt lahendatavaks süsteemiks:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar}{i} \frac{dC_{\kappa}^{(0)}}{dt} &= 0, \\ -\frac{\hbar}{i} \frac{dC_{\kappa}^{(1)}}{dt} &= \sum_{\kappa'} H'_{\kappa\kappa'} e^{i\omega_{\kappa\kappa'} t} C_{\kappa'}^{(0)}, \quad (80) \end{aligned}$$

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{dC_{\kappa}^{(n+1)}}{dt} = \sum_{\kappa'} H'_{\kappa\kappa'} e^{i\omega_{\kappa\kappa'} t} C_{\kappa'}^{(n)}, \quad (80)$$

mis lahendatakse kindlatel algtingimustel. Tavaliselt valitakse nn. statsionaarne algtingimus

$$C_{\kappa}(0) = \delta_{\kappa m}, \quad \kappa = 1, 2, \dots, \quad (81)$$

mille kohaselt vaadeldav objekt hetkel $t = 0$ viibis kindlas statsionaarses olekus φ_m (häirituse "sisselülitamise" kontseptsioon).

Siis

$$C_{\kappa}^{(0)}(t) = C_{\kappa}(0) = \delta_{\kappa m}$$

ning

$$C_{\kappa}^{(1)}(t) = C_{\kappa m}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t H'_{\kappa m} e^{i\omega_{\kappa m} t} dt \quad (82)$$

määrab füüsikaliselt üleminekuamplituudi olekust m olekust k aja t jooksul.

b) Perioodiline häiritus.

Kui häiritus on perioodiline, näit.

$$H'_{\kappa m}(t) = H'_{\kappa m}(0) \cos \omega t, \quad (83)$$

siis

$$C_{\kappa m}^{(1)} = -\frac{1}{2\hbar} H'_{\kappa m}(0) \left[\frac{e^{i(\omega_{\kappa m} + \omega)t} - 1}{\omega_{\kappa m} + \omega} + \frac{e^{i(\omega_{\kappa m} - \omega)t} - 1}{\omega_{\kappa m} - \omega} \right] \quad (84)$$

avaldises tuleb üleminekutõenäosuse arvutamisel arvestada ainult esimest liiget, kui $\omega_{\kappa m} < 0$ (üleminek madalamasse ener-

giatasemesse), või ainult teist liiget, kui $\omega_{km} > 0$ (energia-
tasemete ergutamise).

Tõenäosus, et ajaühikus toimub üleminek olekust energiaga E_m (diskreetne spekter) olekusse energiaga ε_ν (pidev spekter) sageduste intervallis $d\nu$ perioodilise häirituse (83) toimel, on arvutatav valemist

$$dW_{\nu m} = \frac{1}{t} |C_{\nu m}^{(1)}|^2 d\nu = \frac{\pi}{2\hbar} |H'_{\nu m}(0)|^2 \delta(\varepsilon_\nu - E_m - \hbar\omega) d\nu. \quad (85)$$

Kui üleminekutõenäosust tahame määrata lõppolekus energiavahe dE kohta, saame valemi

$$dW_{\varepsilon m} = \frac{\pi}{2\hbar} |H'_{\varepsilon m}(0)|^2 \rho(\varepsilon) \delta(\varepsilon - E_m - \hbar\omega) d\varepsilon, \quad (86)$$

kus $\rho(\varepsilon) d\varepsilon$ on energiale ε vastavate olekute arv intervallis pikkusega $d\varepsilon$.

Kogu üleminekutõenäosus saadakse valemi (86) integreerimisel, s. t.

$$W = \frac{\pi}{2\hbar} |H'_{\varepsilon m}(0)|^2 \rho(\varepsilon), \quad \varepsilon = E_m + \hbar\omega. \quad (87)$$

Sageli antakse häiritusoperaatorile (83) asemel järgmine kuju:

$$H'_{km}(t) = H'_{km}(0) [e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}]. \quad (83')$$

Siis suureneb valemis (85) j -esinev arvuline kordaja 4 korda, näiteks (85) asemel saame

$$dW_{\nu m} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{\nu m}(0)|^2 \delta(\varepsilon_\nu - E_m - \hbar\omega) d\nu, \quad (85')$$

jne.

c) Konstantne häiritus.

Kui momendil $t = 0$ "lülitub sisse" häiritus, mis jääb edaspidi konstantseks, s. t. valemi (83) asemel saame

$$H'_{km}(t) = H'_{km}(0), \quad (83'')$$

siis võime vastavad üleminekuvalemid formaalselt saada eespool tuletatuist, võttes kõikjal $\omega = 0$ (ning ühtlasi arvestades valemis (84) mõlemaid liikmeid, mis tingib arvulise kordaja erinevuse).

Vastavad valemid on:

$$d w_{ym} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{ym}|^2 \delta(\varepsilon_y - E_m) dV, \quad (85'')$$

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{\varepsilon m}|^2 \varrho(\varepsilon), \quad \varepsilon = E_m. \quad (87')$$

Kui lõppolekut iseloomustavad vaba osakese impulsi väärtused p_x, p_y, p_z , siis

$$dV = dp_x dp_y dp_z = p^2 dp d\Omega = mp d\varepsilon d\Omega, \quad (88)$$

kuna $\varepsilon = \frac{p^2}{2m}$ ja $d\Omega$ tähistab impulssvektori \vec{p} suunale vastavat ruuminurga elementi.

Tõenäosus näiteks, et osake konstantse häirituse mõjul lahkub seotud olekust energiaga E_k ja liigub vabana suunas \vec{p} , avaldub valemiga

$$d w_{pk} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{pk}|^2 m p d\Omega, \quad p = \sqrt{2m E_k}. \quad (89)$$

Valemis (89) tuleb maatrikselementide arvutamisel kasutada niisuguseid lõppoleku lainefunktsioone, mis on "normeeritud" δ -funktsiooni abil p -ruumis (valem (3b)).

d) Adiabaatne häiritus.

Adiabaatse häirituse korral ei tarvitse ajast sõltuv hamiltoniaan (häiritus) olla väike, vaid tema muutumise kiirus on väike, mistõttu Schrödingeri võrrandi ligikaudseteks lahenditeks on Hamiltoni operaatori omafunktsioonid antud momendi jaoks. Sellele vastavalt arvutatakse ka omaväärtused E antud momendil ja on üldiselt ajast sõltuvad.

Kui oletada, et hetkel t avaldub olekufunktsioon

$$\psi(t) = \sum_n a_n(t) \varphi_n(t) \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt'\right], \quad (90)$$

kus $\varphi_n(t)$ on ajast sõltuva hamiltoniaani hetkelised omafunktsioonid, s. t.

$$\hat{H}(t) \varphi_n(t) = E_n(t) \varphi_n(t), \quad (91)$$

saame arenduse (90) kordajate jaoks võrrandid

$$\frac{da_k}{dt} = - \sum_n a_n e^{i \int_0^t (E_k - E_n) dt'} \int \varphi_k^* \frac{\partial \varphi_n}{\partial t} (d\vec{r}). \quad (92)$$

Valemit (91) diferentseerides aja järgi ja korrutades funktsiooniga φ_k^* koos järgneva integreerimisega, saame avaldise valemis (92) esineva integraali jaoks:

$$\int \varphi_k^* \frac{\partial \varphi_n}{\partial t} (d\vec{r}) = - \frac{\int \varphi_k^* \left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial t}\right) \varphi_n (d\vec{r})}{E_k - E_n}, \quad n \neq k. \quad (93)$$

Seega omandavad võrrandid (92) kuju

$$\frac{da_k}{dt} = - \sum_n' \frac{a_n}{\hbar \omega_{kn}} \exp\left[i \int_0^t \omega_{kn}(t') dt'\right] \left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial t}\right)_{kn}. \quad (94)$$

Süsteemile (94) asetame algtingimuse

$$a_n|_{t=0} = \delta_{nm}. \quad (95)$$

Oletades suuruste a_n , ω_{kn} , $\frac{\partial H}{\partial t}$, φ_n aeglast muutumist ajas, võime avaldise (94) paremal poolel olevaid suurusi lugeda konstantseteks ja tingimust (95) kehtivaks kõikidel ajahetkedel. Siis saame võrrandile (94) lahendi nn. adiaabatilises lähenduses:

$$a_n(t) \approx \frac{1}{i\hbar \omega_{kn}^2} \left(\frac{\partial H}{\partial t} \right)_{kn} \left(e^{i\omega_{kn}t} - 1 \right), \quad k \neq n \quad (96)$$

Valem (96) on õige, kui üleminekusagedus on tunduvalt erinev hamiltoniaani võimalikust muutumissagedusest, näiteks perioodiliselt muutuva hamiltoniaani korral. Perioodiliselt muutuva hamiltoniaani korral, kui \hat{H} õnnestub esitada kujul

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' \cos \omega t, \quad (77)$$

kus \hat{H}_0 ja \hat{H}' on konstantsed ning $\overline{H'} \ll \overline{H_0}$, taanduvad valemid perioodilise häirituse juhu valemitele.

e) Momentaanse häiritus.

Kui Hamiltoni operaator muutub väga lühikese aja jooksul lõpliku suuruse võrra, võib sellest muutusest tingitud üleminekuid arvutada nn. momentaanse häirituse meetodil. Momentaanse häirituse meetod on rakendatav, kui hamiltoniaani muutumise aeg $\Delta t \ll \frac{1}{\omega_0}$, kus $\omega_0 = \frac{E_0}{\hbar}$ on füüsikalise objekti põhioleku energiale vastav sagedus.

Siis võib oletada, et hamiltoniaani muutus toimus praktiliselt momentaanselt. Valides muutuse momendiks $t = 0$, võime kirjutada, et kui $t < 0$, siis süsteemi kirjeldab hamiltoniaan $\hat{H} = \hat{H}_0$. Vastav omaväärtusprobleem on

$$\hat{H}_0 \varphi_n = E_n \varphi_n. \quad (98)$$

Kui $t > 0$, siis $\hat{H} = \hat{H}_1$ ja omaväärtusprobleemi rahuldavad juba funktsioonid ξ_m :

$$\hat{H}_1 \xi_m = E_m \xi_m. \quad (99)$$

Et leida tõenäosust üleminekule $\varphi_n \rightarrow \xi_m$, kui füüsikaline objekt oli esialgu olekus φ_n , tuleb funktsioon φ_n arendada uue hamiltoniaani omafunktsioonide ξ_m järgi:

$$\varphi_n(\vec{r}) = \sum_m a_m^{(n)} \xi_m(\vec{r}). \quad (100)$$

Arenduse kordajad a_m on üleminekutõenäosuse amplituudideks. Arendus (100) kehtib momendil $t \rightarrow +0$. Momendil $t > 0$ kirjeldab uuritavat objekti juba ajast sõltuv funktsioon

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_m a_m^{(n)} \xi_m(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t}, \quad (101)$$

kus

$$a_m^{(n)} = \int \xi_m^*(\vec{r}) \varphi_n(\vec{r}) (d\vec{r}).$$

5. Põrketeooria valemeid.

a) Partsiaallainete meetod.

Kui põrkuvate osakeste vahel mõjuvad ainult tsentraalsed tungid, võib vastava Schrödingeri võrrandi lahendeid otsida sfäärilistes koordinaatides reaksarendusena Legendre'i polünoomide, nn. partsiaallainete järgi:

$$\psi = \sum_{\ell=0}^{\infty} A_{\ell} R_{\ell}(r) P_{\ell}(\cos \vartheta). \quad (102)$$

Kaugel põrketsentrist peab ψ olema

$$\psi_{as} = (e^{ikz})_{as} + f(\nu) \frac{e^{ikz}}{r}, \quad (103)$$

kusjuures efektiivne diferentsiaalne ristlõige avaldub kujul:

$$d\sigma(\nu) = |f(\nu)|^2 d\Omega. \quad (104)$$

Valemis (103) esinevad funktsioonid e^{ikz} ja $f(\nu)$ arendatakse samuti $P_\ell(\cos\nu)$ järgi ning võrreldakse seejärel avaldise (102) asümptootilise kujuga.

Tulemuseks on järgmine valem:

$$f(\nu) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) [e^{2i\delta_\ell} - 1] P_\ell(\cos\nu). \quad (105)$$

δ_ℓ - nn. hajumisfaasid - on lahendi (102) asümptootilises avaldises esinevate faaside ja pealelangeva laine, e^{ikz} asümptootilistes avaldistes esinevate faaside vahe, k - laine- arv, $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

$$d\sigma = \frac{1}{4k^2} \left| \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) (e^{2i\delta_\ell} - 1) P_\ell(\cos\nu) \right|^2 d\Omega. \quad (106)$$

Integraalne efektiivne ristlõige saadakse üle ruuminurkade integreerides:

$$\sigma = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{4\pi}{k^2} (2\ell+1) \sin^2 \delta_\ell. \quad (107)$$

Kui a tähistab interaktsiooni efektiivset raadiust, siis aeglase osakeste korral, tingimusel $ka \ll 1$, võib arendustes (106 - 107) piirduda vaid rea esimese liikmega, näiteks

$$d\sigma = \frac{1}{4k^2} \left| e^{2i\delta_0} - 1 \right|^2 d\Omega = \frac{\sin^2 \delta_0}{k^2} d\Omega. \quad (106')$$

Kui $\psi = A_0 R_0 = \frac{x}{r} (P_0 = 1)$, saame piirkonnas $r > a$ x jaoks võrrandi

$$\frac{d^2 Z}{dr^2} + \kappa^2 Z = 0, \quad (108)$$

mille lahendi esitame

$$Z = C \sin(\kappa r + \delta_0). \quad (109)$$

Selles lahendis sisalduv faas δ_0 , leitakse Z ja tema tuletise pidevuse tingimusest piirkonnas $r \sim a$.

b) Borni lähendusmeetod.

Kui hajutavat potentsiaali lugeda häirituseks, võib Schrödingeri võrrandi lahendit otsida kujus

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} + \varphi(\vec{r}), \quad (110)$$

kus $\varphi(\vec{r})$ on häiritusliige, mis ühtlasi kirjeldab hajunud osakest, s. t.

$$\varphi(\vec{r})|_{as} = f(\vartheta, \varphi) \frac{e^{i\kappa r}}{r}. \quad (111)$$

Vastavalt häiritusteooriale saadakse $\varphi(\vec{r})$ -le mitte-homogeenne võrrand

$$(\Delta + \kappa^2) \varphi(\vec{r}) = -u(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}}, \quad (112)$$

kus hajutav potentsiaal on $U(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} u(\vec{r})$.

Kui võrrandi (112) lahendame lisatingimusega, et lahendil oleks asümptootiline kuju (111), saame hajumisamplituudi

$f(\vartheta, \varphi)$ jaoks valemi:

$$f(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{4\pi} \int e^{-i\kappa r' \cos \vartheta'} u(\vec{r}') e^{i\vec{k}\vec{r}'} (d\vec{r}'). \quad (113)$$

Kui hajutav potentsiaal on sfäärilis-sümmeetriline, siis

$$f(\vartheta, \varphi) = f(\vartheta) = \frac{1}{K} \int_0^{\infty} u(r) \sin Kr \cdot r dr, \quad (114)$$

kus $K = 2\kappa \sin \frac{\vartheta}{2}$.

Borni meetod on rakendatav küllalt kiirete pealelangevate osakeste korral, kui

$$\frac{|U| a}{\hbar v} \ll 1, \quad (115)$$

kus \overline{U} on potentsiaalse energia mõnesugune keskmine väärtus a - efektiivne mõjuraadius ja v - pealelangeva osakese kiirus.

Aeglaste osakeste korral, $\kappa a \ll 1$, peab hajutamispotentsiaal ja tema mõjuraadius rahuldama tingimust

$$|U| \ll \frac{\hbar^2}{m a^2}. \quad (116)$$

c) Identsete osakeste hajumine.

Kui hajutav ja pealelangev osake on ühte liiki, tuleb arvestada eristamatuseprintsibist järgnevaid sümmeetria nõudeid. Suhtelistes koordinaatides vastab osakeste koordinaatide vahetamisele peegeldusteisendus. Kui $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$, siis $\vartheta \rightarrow \pi - \vartheta$.

Kui hajuvad poolarvulise spiniga osakesed (näit. elektronid), tuleb arvestada kahte juhtu.

1) Kogu spin on null. Siis peab koordinaatide funktsioon olema sümmeetriline. Valemis (103) esinev funktsioon ψ asendub funktsiooniga ψ_s , kus

$$\psi_s = e^{i\kappa z} + e^{-i\kappa z} + \frac{e^{i\kappa z}}{n} [\psi(\vartheta) + \psi(\pi - \vartheta)]. \quad (117)$$

2) Kogu spin on üks. Siis $\psi \rightarrow \psi_a$, kus

$$\psi_a = e^{ikz} - e^{-ikz} + \frac{e^{ikz}}{n} [\varphi(\nu) - \varphi(\pi - \nu)]. \quad (118)$$

Vastavalt

$$\begin{aligned} d\sigma_s &= |\varphi(\nu) + \varphi(\pi - \nu)|^2 d\Omega, \\ d\sigma_a &= |\varphi(\nu) - \varphi(\pi - \nu)|^2 d\Omega. \end{aligned} \quad (119)$$

Kui hajuvatel osakestel ei ole spinid kindla vastastiku-
se orientatsiooniga, siis arvestades, et oleku $S = 0$ statis-
tiline kaal on $\frac{1}{4}$, oleku $S = 1$ kaal aga $\frac{3}{4}$, saame keskmise
efektiivse ristlõike

$$d\sigma = \frac{1}{4} d\sigma_s + \frac{3}{4} d\sigma_a. \quad (120)$$

Masskeskme süsteemis tuleb pealelangeva osakese mass asen-
dada taandatud massiga μ , millel identsete osakeste korral
on väärtus $\mu = \frac{m}{2}$.

Üleminek masskeskme süsteemist laboratoorsesse süsteemi,
kus enne hajutamist teine osake oli paigal, on teostatav valemite
abil

$$\tan \nu_1 = \frac{m_2 \sin \nu}{m_1 + m_2 \cos \nu}; \quad \nu_2 = \frac{\pi - \nu}{2}, \quad (121)$$

kus ν on hajumisnurk masskeskmesüsteemis, ν_1 ja ν_2 -
vastavalt pealelangeva ja paigal olnud (hajutamistsentri) osa-
kese hajumisnurgad laboratoorses süsteemis, m_1 ja m_2 -
nende massid.

d) Mitteelastne hajumine.

Kui koos elastse hajumisega esineb ka osaline mitte-

elastne hajumine, ei muutu üksnes elastselt hajunud osakeste faas, vaid ka amplituud. Kasutades partsiaallainete meetodit, saame sel juhul elastse hajumise valemid, kui $f(\vartheta)$ arenduses (val. (105)) $e^{2i\eta r}$ asendame mõnesuguse kompleksarvuga β_2 . S. t. ψ arenduses (102) radiaalosa funktsioonid

$$R_l \text{ kirjutame } \frac{\beta_2 e^{i(\kappa r - \frac{\pi l}{2})} - e^{-i(\kappa r - \frac{\pi l}{2})}}{2i\kappa r} \quad (122)$$

Siis

$$f(\vartheta) = \frac{1}{2i\kappa} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(\beta_2 - 1) P_l(\cos\vartheta). \quad (123)$$

Kogu elastse hajumise efektiivne ristlõige avaldub

$$\sigma_{el.} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |1 - \beta_2|^2. \quad (124)$$

Kasutades optilist teoreemi, mille põhjal totaalne efektiivne ristlõige $\sigma_{tot.} = \sigma_{el.} + \sigma_{inel.}$ on võrdeline elastselt otse ette hajunud (hajumisnurk $\vartheta=0$) osakeste amplituudi imaginaarosaga, s. o.

$$\sigma_{tot.} = \frac{4\pi}{k} \text{Im} f(0), \quad (125)$$

võime arvutada valemi (123) abil $\sigma_{tot.}$ ning seosest $\sigma_{inel.} = \sigma_{tot.} - \sigma_{el.}$ mitteelastse hajutamise efektiivse ristlõike $\sigma_{inel.}$:

$$\sigma_{inel.} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (1 - |\beta_2|^2). \quad (126)$$

Olgu hajutamistsentri efektiivne mõjuraadius a . Suurus $h\sqrt{l(l+1)}$ iseloomustab impulssmomendi absoluutväärtust

hajutamistsentri suhtes. Kasutades hinnanguteks klassikalist seost $\vec{M} = [\vec{r} \times \vec{p}]$, saame antud l korral pörkeparameetrile n_l järgmise suurusjärgu

$$n_l r \sim \hbar \sqrt{l(l+1)}.$$

või kuna $r = \hbar \kappa^{-1}$, suurte l korral $\sqrt{l(l+1)} \sim l$,

$$\kappa n_l \sim l \quad \text{või} \quad n_l \sim \lambda l, \quad (127)$$

kus $\lambda = 2\pi \tilde{\lambda}$ on hajutatava osakese de Broglie lainepikkus. Hinnanguid (127), võib kasutada selleks, et valemeid (124), (126) lihtsustada.

Kui näiteks kiired neutronid langevad nn. "absoluutselt mustale" tuumale, siis kõik need, millede korral $n_l \lesssim a$, neelduvad, mistõttu avaldises (126) võib asendada

$$1 - |\beta_l|^2 = 1 \quad , \quad \text{kui} \quad n_l \lesssim a \quad \text{või} \quad l \lesssim \kappa a,$$

$$1 - |\beta_l|^2 = 0 \quad , \quad \text{kui} \quad n_l > a \quad \text{s. t.} \quad l > \kappa a,$$

ja lõpmatu summa taandub lõplikuks.

Aeglaste osakeste korral, kui $\tilde{\lambda} \gg a$ või $\kappa a \ll 1$, võib piirduda nn. S-hajumisega, s. o. juhuga, kui $l = 0$. Siis võime piirkonnas $r < a$ radiaalosa R_0 võrrandis

$$R_0'' + \frac{2}{r} R_0' + \kappa^2 R_0 - u(r) R_0 = 0 \quad (127)$$

jätta k^2 -ga võrdelise liikme ära, mistõttu (127) lahend ei sõltu lainearvust k .

Piirkonnas $r > a$ langeb seevastu viimane liige ära ($u(r) = 0$), mistõttu selles piirkonnas (127) lahendi võime avaldada

$$R_0 = \frac{1}{2ikr} (C_1 e^{ikr} + C_2 e^{-ikr}), \quad (128)$$

kusjuures konstandid c_1 ja c_2 sõltuvad lainearvust k . Avaldise (128) ja (122) võrdlus võimaldab määrata $\beta_0 = -\frac{c_1}{c_2}$. c_1 ja c_2 , samuti β_0 sõltuvuse suurusest k määrab pidevuse tingimus kummagi piirkonna kokkupuutepunktis $r \sim a$.

Mitteelastset hajumist võib iseloomustada ka diferentsiaalse efektiivse ristlõike abil. Sel korral vaadeldakse hajumist kui üleminekut pealelangevast ja hajuvast osakesest koosneva süsteemi lähteolekust $\chi_\alpha(\tau)$ lõppolekusse $\chi_{\alpha'}(\tau)$. Siin on α (α') mõnesuguste kvantarvude (parameetrite) kompleksid, mis määravad lähteoleku (lõppoleku), τ -süsteemi iseloomustavatele vabadusastmetele vastavad muutujad. Suhtelistes koordinaatides \vec{r} kirjeldab lähte- ja lõppolekut vastavalt tasalaine ja sfääriliselt hajuv laine, s. t.

$$\psi_\alpha(\vec{r}) = \chi_\alpha e^{i\vec{k}\vec{r}}, \quad \psi_{\alpha'} = \chi_{\alpha'} f_{\alpha'\alpha}(v') \frac{e^{i\kappa'r}}{r}, \quad (129)$$

kus v' on olekusse α' hajunud osakese hajumisnurk.

Valemeist (129) on lihtne arvutada efektiivne ristlõige

$$\sigma_{\alpha'\alpha}(v') = \frac{v'}{v} |f_{\alpha'\alpha}(v')|^2, \quad (130)$$

kus $v = \frac{\hbar k}{\mu}$, $v' = \frac{\hbar k'}{\mu'}$, μ , μ' - vastavate osakeste taandatud massid.

Kasutades näiteks Borni lähendusmeetodit saame amplituudi $f_{\alpha'\alpha}(v')$ arvutamiseks valemiga (113) analoogilise avaldise

$$f_{\alpha'\alpha} = \frac{1}{4\pi} \int (d\vec{r}) e^{i(\vec{k}' - \vec{k})\vec{r}} \langle u(\vec{r}) \rangle_{\alpha'\alpha}, \quad (131)$$

kus võrreldes (113)-ga on ainult potentsiaalse energia $u(\vec{r})$ asemel tema vastav maatrikselement

$$\langle u(\vec{r}) \rangle_{\alpha\alpha} = \int \chi_{\alpha}^*(\tau) u(\vec{r}, \tau) \chi_{\alpha}(\tau) (d\tau). \quad (132)$$

Olenevalt sellest, kas τ on pidevate või diskreetsete muutujate kompleks, tuleb valemis (132) võtta integraal või summa. Valemis (130 - 132) kasutatakse näiteks vabade elektronide mitteelastse hajumise uurimiseks aatomielektronidel. Siis sõltub χ_{α} aatomi olekufunktsioonidest.

6. Kiirgusprobleem.

Kui piirduda mitterelativistliku laetud osakesega ning jätta arvestamata spin, võib osakese interaktsiooni kiirgusväljaga ($\text{div } \vec{A} = 0$) valemi (21) põhjal kirjeldada hamiltoniaaniga \hat{H}' :

$$\hat{H}' = - \frac{e}{mc} (\vec{A} \cdot \hat{p}) + \frac{e^2}{2mc^2} A^2. \quad (133)$$

Kooskõlas elektromagnetvälja kvantteooriaga arendame potentsiaali \vec{A} tasapinnaliste lainete järgi nn. perioodsuse ruumalaga L^3 :

$$\vec{A} = \sum_{\lambda} (\hat{e}_{\lambda} \vec{A}_{\lambda} + \hat{e}_{\lambda}^+ \vec{A}_{\lambda}^*), \quad (134)$$

kus

$$\vec{A}_{\lambda} = \hat{e}_{\lambda} \sqrt{\frac{4\pi c^2}{L^3}} e^{i(\vec{k}_{\lambda} \cdot \vec{r} - \omega_{\lambda} t)}, \quad (135)$$

ning \hat{e}_{λ} on antud levikuvektoriga \vec{k}_{λ} laine polarisatsioonvektor ja $\omega_{\lambda} = c k_{\lambda}$.

Operaatorid \hat{b}_λ ja \hat{b}_λ^\dagger on vastavalt footonite neeldumise ja kiirgumise operaatorid, millel footonite arvude $n_1, n_2, \dots, n_\lambda, \dots$ ruumis on järgmised nullist erinevad maatrikselemendid:

$$\begin{aligned} (n_1, \dots, n_\lambda, \dots | \hat{b}_\lambda | n_1, \dots, n_\lambda + 1, \dots) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_\lambda}} (n_\lambda + 1), \\ (n_1, \dots, n_\lambda, \dots | \hat{b}_\lambda^\dagger | n_1, \dots, n_\lambda - 1, \dots) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_\lambda}} n_\lambda. \end{aligned} \quad (136)$$

Valemitest (136) järeneb, et viimane liige hamiltoniaanis (133) kirjeldab kahefotoonseid üleminekuid. Seepärast võime ühefotoonsete üleminekutega piirdudes selle liikme ära jätta.

Vastavalt valemile (85') kirjeldab aatomi ülemineku tõenäosust ajaühikus olekust 1 olekusse 2 footoni neeldumise-ga järgmine avaldis:

$$dW_{21} = \frac{2\pi}{\hbar} |(2, n_\lambda - 1 | H' | 1, n_\lambda)|^2 \varrho(\omega) d\Omega, \quad (137)$$

kus $\varrho(\omega) = \frac{\omega^2 L^3}{(2\pi c)^3 \hbar}$ on antud sagedusega elektromagnetvälja ostsillaatorite energeetiline tihedus ruumis L^3 ,

$$(2, n_\lambda - 1 | H' | 1, n_\lambda) = -\frac{e}{m} \sqrt{\frac{2\pi \hbar n_\lambda}{L^3 \omega_\lambda}} \int \psi_2^*(\vec{r}) e^{i\vec{k}_\lambda \vec{r}} \left(\frac{\vec{e}_\lambda \cdot \vec{p}}{r} \right) \psi_1(\vec{r}) d\vec{r}. \quad (138)$$

Pidades silmas viimast avaldist ning $\varrho(\omega)$ kuju, saame

$$dW_{21} = \frac{e^2 \omega_\lambda}{m^2 2\pi \hbar c^3} \left| \left(e^{i\vec{k}_\lambda \vec{r}} \left(\frac{\vec{e}_\lambda \cdot \vec{p}}{r} \right) \right)_{21} \right|^2 n_\lambda d\Omega, \quad (\omega_\lambda = \omega_{21}). \quad (139)$$

Analoogilise valemi saame kiirguse tõenäosuse jaoks ajaühikus, kui toimub üleminek $2 \rightarrow 1$:

$$dW_{12} = \frac{e^2 \omega_\lambda}{m^2 2\pi \hbar c^3} \left| \left(e^{-i\vec{k}_\lambda \vec{r}} \left(\frac{\vec{e}_\lambda \cdot \vec{p}}{r} \right) \right)_{12} \right|^2 (n_\lambda + 1) d\Omega. \quad (140)$$

Kui footoni lainepikkus $\lambda \gg a$, kus a on aatomi efektiivne mõõde, võime valemis (139 - 140) teha asenduse $e^{\pm i\vec{k}_\lambda \vec{r}} \approx 1$.

Arvestades seost

$$(\vec{p})_{12} = m (\vec{v})_{12} = im \omega_{12} (\vec{r})_{12} = -\frac{im}{\epsilon} \omega_{12} (\vec{d})_{12}, \quad (141)$$

kus \vec{d} on osakese dipoolmoment, saame

$$dw_{12} = \frac{\omega^3}{2\pi \hbar c^3} |d_{12}|^2 \cos^2 \mathcal{J} (n_\lambda + 1) d\Omega, \quad (142)$$

kus \mathcal{J} on nurk \vec{d} ja kiiratud footoni polarisatsioonivektori \vec{e}_λ vahel.

Valem (142) annab dipoolkiirguse tõenäosuse ajaühikus.

Spontaanse kiirguse intensiivsuse (ajaühikus) saame, kui avaldised (142) võtame $n_\lambda = 0$, korrutame footoni energiaga $\hbar\omega$ ning integreerime üle $d\Omega$:

$$\frac{dE}{dt} = \frac{4\omega^4}{3c^3} |d_{12}|^2. \quad (143)$$

Kui arvestame $e^{-i\vec{k}_\lambda \vec{r}}$ arenduses järgmisi liikmeid, saame nullist erinevad ülemineku tõenäosused ka niisuguste olekute vahel, kus dw esimeses lähenduses (dipoolses) on null.

Avaldis

$$dw = \frac{e^2 \omega^3}{2\pi \hbar c^3} \left| \left((\vec{r})_{12} \vec{e}_\lambda \right) (\vec{k}_\lambda \vec{r})_{12} \right|_{21}^2 (n_\lambda + 1) d\Omega \quad (144)$$

annab näiteks elektrilise kvadrupoolse ning magnetilise dipoolkiirguse summaarse tõenäosuse.

Kui elektroni kirjeldaksime Diraci võrrandi abil, s. t.

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{H}') \psi, \quad (145)$$

$$\text{kus } \hat{H}_0 = c \sum_{k=1}^3 \alpha_k \hat{p}_k + e \phi + \beta m c^2,$$

$$\hat{H}' = -e \sum_{k=1}^3 \alpha_k A_k = -e (\vec{\alpha} \vec{A}),$$

(Siin α_k ja β on 4-rea-veerulised Diraci maatriksid, saaksime valemi (140) asemel

$$dW_{12} = \frac{e^2 \omega}{2\pi c \hbar} \left[(\vec{\alpha}_{12}^+ \vec{\alpha}_{12}) - \frac{(\vec{\alpha}_{12}^+ \vec{k}_\lambda)(\vec{\alpha}_{12} \vec{k}_\lambda)}{k^2} \right] (n_\lambda + 1) d\Omega, \quad (140')$$

$$\text{kus } \vec{\alpha}_{12} = \int \psi_1^* \vec{\alpha} e^{-i \vec{k}_\lambda \vec{r}} \psi_2 (d\vec{r}).$$

Avaldis (140') annab footoni kiirgumise tõenäosuse antud levikvektoriga \vec{k}_λ , kuid keskmistatuna üle kahe võimaliku polarisatsiooni suuna.

Üleminek valemilt (140') vastavale mitterelativistlikule valemile toimub formaalse asendusega $(\vec{\alpha})_{12} \rightarrow \frac{1}{mc} (\vec{p})_{12}$.

7. Relativistlik elektron.

Dirac'i võrrandist (145) on võimalik tuletada kahekomponendiline võrrand, kui oletada, et elektroni koguenergia erineb vähe tema seisue energiast mc^2 , s. t. kui relativistlikke efekte vaadelda parandusliikmete põhjusena mitte-relativistlikele suurustele.

Et võrrandist (145) saada kahekomponendilist võrrandit, teeme asendused

$$\psi = \psi' \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(mc^2 + E)t\right]; \quad \psi' = \begin{pmatrix} \psi \\ \chi \end{pmatrix}, \quad (146)$$

kus φ ja χ on kahekomponendilised spinnorid.

Kui kasutame Dirac'i maatriksite kuju

$$\alpha_k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix}, \quad k = 1, 2, 3, \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \quad (147)$$

kus σ_k on Pauli spinmaatriksid (kõik α_k ja β maatriksite elemendid on sisuliselt teist järku maatriksid), saame

võrrandid funktsioonidele φ ja χ . Eeldusel, et

$|E - U| \neq 2mc^2$ ($U = e\phi$), mis on õige, kui $|E - U| \ll mc^2$, võime χ elimineerida ja saame

$$E\varphi = \left\{ U + \frac{1}{2m} \vec{\sigma} \left(\hat{p}^2 - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \left(1 + \frac{E - U}{2mc^2} \right)^{-1} \vec{\sigma} \left(\hat{p}^2 - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \right\} \varphi. \quad (148)$$

Kasutades ligikaudseid asendusi

$$\left(1 + \frac{E - U}{2mc^2} \right)^{-1} \approx 1 - \frac{E - U}{2mc^2}; \quad \frac{e^2}{4m^2 c^4} A^2 (E - U) \rightarrow 0,$$

saame

$$E\varphi = \left\{ \frac{(\hat{p}^2 - \frac{e}{c} \vec{A})^2}{2m} - \frac{e\hbar}{2mc} (\vec{\sigma} \text{ rot } \vec{A}) + U - \frac{E - U}{2mc^2} \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{i\hbar}{4m^2 c^2} \nabla U \hat{p} + \frac{\hbar}{4m^2 c^2} \vec{\sigma} [\nabla U \times \hat{p}] \right\} \varphi. \quad (149)$$

Mitterelativistlikku võrrandit arvestades võime avaldise

(149) paremal pool neljandas liikmes teha asenduse $E - U \approx \frac{\hbar^2}{2m}$.

Tsentraalsümmeetrilises väljas, $U = U(r)$,

$$\nabla U = \frac{dU}{dr} \frac{\vec{r}}{r}. \quad [\vec{r} \times \hat{p}] = \vec{M}.$$

Neid märkusi arvesse võttes saame

$$E\varphi = \left\{ \frac{(\hat{p}^2 - \frac{e}{c} \vec{A})^2}{2m} + U - \frac{e\hbar}{2mc} (\vec{\sigma} \text{ rot } \vec{A}) - \frac{\hbar^2}{8m^2 c^2} - \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} \frac{dU}{dr} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dU}{dr} (\vec{S} \cdot \vec{M}) \right\} \varphi. \quad (150)$$

Valemi (150) ülemises reas olevad liikmed annavad mitterelativistliku kahekomponendilise Pauli võrrandi, alumise rea esimene liige on tingitud massi relativistlikust sõltuvusest kiirusest, viimane liige annab spin-orbitaalse interaktsiooni.

Relativistliku vesiniku aatomi lahendamisel on otstarbekas kasutada kvadreeritud Dirac'i võrrandit, mis pärast muutujate eraldamist taandub radiaalosa ja nurgamuutujaist sõltuva osa võrrandiks:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - A + \frac{2B}{r} + \frac{\alpha'^2 + \lambda}{r^2} \right] R(r) = 0, \quad (151)$$

$$[(\Delta_{\omega, \varphi})^{-\lambda} + i \alpha' (\vec{\alpha} \vec{n}_0)] \phi(\omega, \varphi) = 0, \quad (152)$$

kus

$$\alpha' = \frac{e^2}{\hbar c}; \quad A = \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \left[1 - \left(1 + \frac{E}{m c^2} \right)^2 \right];$$

$$B = \frac{m e^2}{\hbar^2} \left(1 + \frac{E}{m c^2} \right); \quad -m c^2 \ll E < 0. \quad (153)$$

Kuna võrrand (151) on sama mis mitterelativistlikul juhulgi, on tal regulaarseid lahendeid, kui

$$A = \frac{B^2}{(n_r + l' + 1)^2} \quad (154)$$

kus

$n_r = 0, 1, 2, \dots$, l' on määratud tingimusest

$$l'(l'+1) = -(\alpha'^2 + \lambda).$$

Tingimus (154) annab diskreetse energiaspektri. Kui kasutame arendust α'^2 astmete järgi, saame

$$E_{n, j} = - \frac{m e^4 Z^2}{2 \hbar^2 n^2} \left[1 + \frac{\alpha'^2 Z^2}{n^2} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right], \quad (155)$$

$$1 \leq j + \frac{1}{2} \leq n.$$

Diskreetsele energiaspektrile vastavad omafunktsioonid võime avaldada kujul:

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = \begin{cases} \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}} g(r) y_{l, m-\frac{1}{2}}(r, \vartheta, \varphi) \\ -\sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}} g(r) y_{l, m+\frac{1}{2}}(r, \vartheta, \varphi) \\ -i\sqrt{\frac{l-m+\frac{3}{2}}{2l+3}} f(r) y_{l+1, m-\frac{1}{2}}(r, \vartheta, \varphi) \\ -i\sqrt{\frac{l+m+\frac{3}{2}}{2l+3}} f(r) y_{l+1, m+\frac{1}{2}}(r, \vartheta, \varphi), \text{ kui } j = l + \frac{1}{2}; \end{cases} \quad (156)$$

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = \begin{cases} \sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}} g(r) y_{l, m-\frac{1}{2}}(r, \vartheta, \varphi) \\ \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}} g(r) y_{l, m+\frac{1}{2}}(r, \vartheta, \varphi) \\ -i\sqrt{\frac{l+m-\frac{1}{2}}{2l-1}} f(r) y_{l-1, m-\frac{1}{2}}(r, \vartheta, \varphi) \\ -i\sqrt{\frac{l-m-\frac{1}{2}}{2l-1}} f(r) y_{l-1, m+\frac{1}{2}}(r, \vartheta, \varphi), \text{ kui } j = l - \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (156')$$

$y_{l, m}(r, \vartheta, \varphi)$ on normeeritud kerapinnafunktsioonid, normeeritud radiaalosa funktsioonid, s. t. $f(r)$ ja $g(r)$ avalduvad kõdunud hüpergeomeetriliste funktsioonide $F(\alpha; \gamma; r)$ kaudu:

$$\begin{aligned}
 f(n) = & -\frac{\sqrt{\Gamma(2\gamma+n'+1)}}{\Gamma(2\gamma+1)\sqrt{n'}} \sqrt{\frac{1-\varepsilon}{4N(N-\varepsilon)}} \left(\frac{2Z}{Na_0}\right)^{3/2} \\
 & \cdot e^{-\frac{Zn}{Na_0}} \left(\frac{2Zn}{Na_0}\right)^{\gamma-1} \left\{ n' F(-n'+1; 2\gamma+1; \frac{2Zn}{Na_0}) + \right. \\
 & \left. + (N-\varepsilon) F(-n'; 2\gamma+1; \frac{2Zn}{Na_0}) \right\}, \quad (157)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 g(n) = & -\frac{\sqrt{\Gamma(2\gamma+n'+1)}}{\Gamma(2\gamma+1)\sqrt{n'}} \sqrt{\frac{1+\varepsilon}{4N(N-\varepsilon)}} \left(\frac{2Z}{Na_0}\right)^{3/2} \\
 & \cdot e^{-\frac{Zn}{Na_0}} \left(\frac{2Zn}{Na_0}\right)^{\gamma-1} \left\{ -n' F(-n'+1; 2\gamma+1; \frac{2Zn}{Na_0}) + \right. \\
 & \left. + (N-\varepsilon) F(-n'; 2\gamma+1; \frac{2Zn}{Na_0}) \right\}. \quad (157')
 \end{aligned}$$

Siin $\varepsilon = -(l+1)$, kui $j = l + \frac{1}{2}$, ning $\varepsilon = +l$, kui $j = l - \frac{1}{2}$;

$$\gamma = +\sqrt{\varepsilon^2 - \alpha'^2 Z^2}; \quad \varepsilon = \frac{E}{mc^2} = \left\{ 1 + \frac{\alpha'^2 Z^2}{(n'+\gamma)^2} \right\}^{-\frac{1}{2}};$$

$$n' = \frac{\alpha' Z \varepsilon}{\sqrt{1-\varepsilon^2}}; \quad n = n' + j + \frac{1}{2}, \quad \text{kus } n \text{ on peakvantarv.}$$

$$N = \sqrt{n^2 - 2n'(j + \frac{1}{2} - \sqrt{(j + \frac{1}{2})^2 - \alpha'^2 Z^2})}; \quad N \rightarrow n, \quad \text{kui } \alpha \rightarrow 0.$$

Kui saadud avaldistes $\alpha' \rightarrow 0$, siis $\varepsilon \rightarrow 1$ ja $f \rightarrow 0$.

Rekurrentne seos

$r F(\alpha+1; \gamma+1; r) = \gamma F(\alpha+1; \gamma; r) - \gamma F(\alpha; \gamma; r)$ näitab, et sel juhul $q(r)$ annab mitterelativistliku vesinikusarnase aatomi energia omafunktsiooni radiaalosa:

$$R_{nl}(r) = \frac{1}{(2l+1)!} \sqrt{\frac{(n+l)!}{(n-l-1)! 2^n}} \left(\frac{2Z}{a_0 n}\right)^{3/2} \cdot e^{-\frac{Zr}{n}} \left(\frac{2Zr}{n}\right)^l F(-(n-l-1); 2l+2; \frac{2Zr}{n}),$$

$$r_1 = \frac{n}{a_0}. \quad (158)$$

8. Impulssmomentide liitmine jm. küsimused.

a) Impulssmomentide liitmine, Clebsch-Gordan'i koefitsiendid.

Koosnegu füüsikaline süsteem alaosüsteemidest A ja B, millele interaktsiooni võime jätta arvestamata. Viibigu alaosüsteem A kindla impulssmomentiga olekus, mida iseloomustab kvantarv j_1 , alaosüsteem B vastavalt olekus, millele vastab kvantarv j_2 . Süsteemi kui tervikut võime siis iseloomustada $(2j_1+1)(2j_2+1)$ funktsiooniga $\psi_{j_1 m_1}(A) \psi_{j_2 m_2}(B)$, kus $-j_1 \leq m_1 \leq j_1$, $-j_2 \leq m_2 \leq j_2$.

Samaaegselt operaatoritega \hat{J}_A^2 ja \hat{J}_B^2 on kindel väärtus ka summaarse momendi operaatoril $\hat{J}^2 = \hat{J}_A^2 + \hat{J}_B^2 + 2\hat{J}_A \hat{J}_B$. Tema omaväärtused on iseloomustatud kvantarvuga j , millel

võivad olla järgmised väärtused:

$$j = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2|. \quad (159)$$

Kuna \hat{J}^2 ei kommuteeru operaatoritega \hat{J}_{2A} ja \hat{J}_{2B} , ei ole funktsioonid $\psi_{j_1 m_1}(A) \psi_{j_2 m_2}(B)$ tema omafunktsioonideks, küll aga \hat{J}_z omafunktsioonideks. \hat{J}^2 ja \hat{J}_z ühised omafunktsioonid $\psi_{j, m}$ võime esitada funktsioonide

$$\psi_{j_1 m_1}(A) \psi_{j_2 m_2}(B) \quad \text{lineaarkombinatsioonidena:}$$

$$\psi_{j, m}(A, B) = \sum_{m_1, m_2} \delta(m_1 + m_2, m) C_{j_1 j_2, m_1 m_2}^{j, m} \psi_{j_1 m_1}(A) \psi_{j_2 m_2}(B). \quad (160)$$

Valemis (160) esinevaid arenduse kordajaid $C_{j_1 j_2, m_1 m_2}^{j, m}$ nimetatakse Clebsch-Gordani koefitsientideks. Normeeritud omafunktsioonide $\psi_{j, m}, \psi_{j_1 m_1}, \psi_{j_2 m_2}$ korral

$$C_{j_1 j_2, m_1 m_2}^{j, m} = \left[\frac{2j+1}{(j_1+j_2+j+1)} (j_2+j-j_1)! (j_1+j-j_2)! \cdot \right. \\ \cdot (j_1+j_2-j)! (j_1+m_1)! (j_1-m_1)! (j_2+m_2)! (j_2-m_2)! \cdot \\ \left. \cdot (j+m)! (j-m)! \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (161)$$

$$\cdot \frac{(-1)^z}{z! (j_1+j_2-j-z)! (z+j-j_1-m_2)!} \cdot \\ \cdot \frac{1}{(j_2+m_2-z)! (z+j-j_2+m_1)! (j_1-m_1-z)!} ,$$

kus $m_1 + m_2 = m$, summeerimisindeks z kulgeb üle mitte-

negatiivsete täisarvude, mis pole väiksemad kui $m_2 + j_1 - j$ või $j_2 - j - m_1$, ega ületa $j_1 + j_2 - j$, $j_2 + m_2$ või $j_1 - m_1$. Lidetavate arv valem (161) summas on ühe võrra suurem vähimast arvust järgmiste arvude hulgas

$$j_2 - m_2; j_1 + m_1; j_2 - j_1 + j; j + m; j - m; \\ j_1 + j - j_2; j_1 + j_2 - j; j_2 + m_2; j_1 - m_1.$$

Erijuhud. 1) Kui $j_1 = \frac{1}{2}$, $j_2 \geq \frac{1}{2}$, siis saame Clebsch-Gordani koefitsientidele järgmise tabeli:

m_1	$j = j_2 + \frac{1}{2}$	$j = j_2 - \frac{1}{2}$	
$-\frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{j_2 - m + \frac{1}{2}}{2j_2 + 1}}$	$\sqrt{\frac{j_2 + m + \frac{1}{2}}{2j_2 + 1}}$	(162)
$+\frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{j_2 + m + \frac{1}{2}}{2j_2 + 1}}$	$-\sqrt{\frac{j_2 - m + \frac{1}{2}}{2j_2 + 1}}$	

2) kui $j_1 = 1$, $j_2 \geq 1$, siis

m_1	$j = j_2 + 1$	$j = j_2$	$j = j_2 - 1$	
-1	$\sqrt{\frac{(j_2 - m + 1)(j_2 - m)}{(2j_2 + 2)(2j_2 + 1)}}$	$\sqrt{\frac{(j_2 + m + 1)(j_2 - m)}{2j_2(j_2 + 1)}}$	$\sqrt{\frac{(j_2 + m)(j_2 + m + 1)}{2j_2(2j_2 + 1)}}$	
0	$\sqrt{\frac{(j_2 + m + 1)(j_2 - m + 1)}{(j_2 + 1)(2j_2 + 1)}}$	$\frac{m}{\sqrt{j_2(j_2 + 1)}}$	$\sqrt{\frac{(j_2 + m)(j_2 - m)}{j_2(2j_2 + 1)}}$	(163)
+1	$\sqrt{\frac{(j_2 + m + 1)(j_2 + m)}{(2j_2 + 2)(2j_2 + 1)}}$	$-\sqrt{\frac{(j_2 - m + 1)(j_2 + m)}{2j_2(j_2 + 1)}}$	$\sqrt{\frac{(j_2 - m + 1)(j_2 - m)}{2j_2(2j_2 + 1)}}$	

b) Paarsuse ja isospiniga seotud valikureeglid.

Kui osakeste interaktsiooni hamiltoniaan on invariantne peegeldusteisenduste suhtes koordinaatruumis, võivad toimuda ainult niisugused protsessid, kus alg- ja lõppolekus on osakeste süsteemil sama paarsus.

Olekutes, mis on iseloomustatud orbitaalse impulssmomenti kindla absoluutväärtusega (kvantarv l), on osakese paarsus määratud avaldisega $J = (-1)^l$. Sama valem kehtib kahest osakesest koosneva süsteemi korral, kui nende (suhtelist) impulssmomenti masskeskme suhtes iseloomustab kvantarv l . Mitmest osakesest koosneva süsteemi korral, vastavalt olekutes kvantarvudega l_1, l_2, \dots, l_N , määrab süsteemi paarsuse nende kvantarvude (algebraalne) summa: $J = (-1)^{l_1 + \dots + l_N}$.

Mitmest sama liiki osakesest koosneva süsteemi puhul tuleb arvestada olekufunktsioonide sümmeetriaomadusi. Bosonite olekufunktsioonid peavad olema sümmeetrilised mistahes spinide ja koordinaatide paari vahetamise suhtes. Kui tähistame spinfunktsioone $\chi(\sigma)$, koordinaatfunktsioone $\varphi(\vec{r})$ (σ on kõikide osakeste spinmuutujate kompleks, \vec{r} - vastavalt raadiusvektorite kompleks), siis on võimalik sümmeetrilist olekufunktsiooni $\psi_s(\sigma, \vec{r})$ moodustada järgmistest kombinatsioonidest:

$$\psi_s = \chi_s(\sigma) \varphi_s(\vec{r}) \quad \text{või} \quad \psi_a = \chi_a(\sigma) \varphi_a(\vec{r}), \quad (164)$$

kus indeks s tähistab sümmeetrilist, indeks a - antisümmeetrilist funktsiooni. Kahe osakese korral suhtelistes koor-

dinaatides on $\varphi_s(\vec{n})$ lihtsalt paaris, $\varphi_a(\vec{n})$ paaritu funktsioon (olekud vastavalt paarsustega $+1$ ja -1). Seega $\varphi_s(\vec{n})$ võib (kahe osakese korral) sõltuda ainult paarisarvulistest l väärtustest, φ_a vastavalt ainult paarituarvulistest l väärtustest.

Fermionide korral asenduvad valemid (164) ψ antisümmeetria nõuetele vastavalt järgmistega:

$$\psi_a = \chi_a(\sigma) \varphi_a(\vec{n}) \text{ või } \psi_a = \chi_a(\sigma) \varphi_s(\vec{n}). \quad (165)$$

Kahest elektronist koosneva süsteemi korral χ_s vastab koguspinile $S = 1$, χ_a - koguspinile $S = 0$.

Fermionide kohta kehtib Pauli keeluprintsiip, mille kohaselt fermionide süsteemis tõenäosus leida mitut osakest samas kvantolekus on null.

c) Isospin.

Prootonit ja neutronit võib iseloomustada kui nukleoni kahte olekut, mida iseloomustab erinev elektrilaeng. Prootonis olekus on laengu väärtus 1 (möödetud elementaarlaengutes), neutroonis olekus 0 .

Sellele vastavalt võime nukleoni kirjeldada kahekomponendilise olekufunktsiooniga

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_p \\ \psi_n \end{pmatrix}$$

või, arvestades normeerimistingimust $|\psi_p|^2 + |\psi_n|^2 = 1$,

$$\psi_p = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_n = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (166)$$

Operaatorid

$$\hat{T}_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{T}_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{T}_3 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (167)$$

moodustavad nn. isospinivektori. Valemid (166, 167) näitavad, et ψ_p ja ψ_n on \hat{T}_3 omaolekuteks, mis vastavad omaväärtusele $+\frac{1}{2}$ (prooton) ja $-\frac{1}{2}$ (neutron). Kui spini eeskujul iseloomustada nukleoni ka isospini absoluutväärtuste ruuduga, \hat{T}^2 , mille omaväärtused avalduvad kujul $\tau(\tau+1)$, näeme, et nukleonile peame vastavusse seadma kvantarvu $\tau = \frac{1}{2}$. Nukleoni laengu operaator \hat{q} on defineeritud valemiga:

$$\hat{q} = \hat{T}_3 + \frac{1}{2} I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (168)$$

π -mesonid, π^\pm ja π^0 , moodustavad isotoopilises ruumis tripleti, s. t. me võime neid vaadelda jälle kui ühe ja sama osakese kolme erinevat olekut ψ_+ , ψ_0 ja ψ_- , kus

$$\psi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \psi_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \psi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (169)$$

Isospinivektorit võime sel korral iseloomustada maatriksitega

$$\hat{T}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{T}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{T}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (170)$$

Seega ψ_+ , ψ_0 ja ψ_- on \hat{T}_3 omaolekuteks omaväärtustega vastavalt $+1$ (π^+), 0 (π^0) ja -1 (π^-). Operaatori \hat{T}^2 absoluutväärtust iseloomustab kvantarv 1 .

π -mesoni korral võrdub laengu operaator \hat{q} lihtsalt operaatoriga \hat{T}_3 , s. t.

$$\hat{q} = \hat{T}_3 . \quad (171)$$

Mesonist ja nukleonist koosnevat süsteemi võime iseloomustada nn. summaarse isotoopilise momendiga \hat{T} :

$$\hat{T} = \hat{T}_N + \hat{T}_\pi . \quad (172)$$

Kooskõlas tuumatungide laengulise sõltumatuse hüpoteesiga on mesonist ja nukleonist koosnevas süsteemis \hat{T}^2 ja \hat{T}_3 liikumisintegraalideks.

LISA B. VALEMEID JA SPETSIAALSETE FUNKTSIOONIDE OMADUSI.

1. Harmoonilise ostsillaatori omafunktsioonid
ja Hermite'i polünoomid.

Lineaarse harmoonilise ostsillaatori energia omaväärtus-
probleemi

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2\psi = E\psi \quad (1)$$

lahendeiks on omaväärtused $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ ja vastavad
omafunktsioonid

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi} x_0}} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \mathcal{H}_n(\xi), \quad (2)$$

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad \xi = \frac{x}{x_0}.$$

Valemis (2) esinevad Hermite'i polünoomid $\mathcal{H}_n(x)$ on defi-
neeritud valemiga

$$\mathcal{H}_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \quad (3)$$

või, alates kõrgeimast astmest

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_n(x) = & 2^n x^n - 2^{n-1} \binom{n}{2} x^{n-2} + 2^{n-2} \cdot 1 \cdot 3 \cdot \binom{n}{4} x^{n-4} - \\ & - 2^{n-3} \cdot 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \binom{n}{6} x^{n-6} + \dots \end{aligned} \quad (4)$$

Valemist (4) saame näiteks erijuhud

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_0(x) &= 1; & \mathcal{H}_3(x) &= 8x^3 - 12x; \\
 \mathcal{H}_1(x) &= 2x; & \mathcal{H}_4(x) &= 16x^4 - 48x^2 + 12; \\
 \mathcal{H}_2(x) &= 4x^2 - 2; & \mathcal{H}_{2n}(0) &= (-1)^n 2^n (2n-1)!!; \\
 & & \mathcal{H}_{2n+1}(0) &= 0.
 \end{aligned} \tag{5}$$

Erinevat järku polünoomid $\mathcal{H}_n(x)$ on seotud järgmis-
te rekursioonivalemitega:

$$\frac{d \mathcal{H}_n(x)}{dx} = 2n \mathcal{H}_{n-1}(x); \tag{6_1}$$

$$\mathcal{H}_{n+1}(x) = 2x \mathcal{H}_n(x) - 2n \mathcal{H}_{n-1}(x), \tag{6_2}$$

rahuldavad ortogonaalsusetingimust

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} \mathcal{H}_n(x) \mathcal{H}_m(x) dx = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{nm} \tag{7}$$

ja diferentsiaalvõrrandit

$$\frac{d^2 \mathcal{H}_n}{dx^2} - 2x \frac{d \mathcal{H}_n}{dx} + 2n \mathcal{H}_n = 0, \tag{8}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{H}_n(x) \frac{t^n}{n!} = e^{x^2 - (t-x)^2}. \tag{9}$$

Hermite'i polünoomid on järgmiselt seotud kõdunud hüper-
geomeetriliste funktsioonidega $F(\alpha; \gamma; x)$:

$$\mathcal{H}_{2n}(x) = (-1)^n \frac{(2n)!}{n!} F(-n; \frac{1}{2}; x^2);$$

$$\mathcal{H}_{2n+1}(x) = (-1)^n 2 \frac{(2n+1)!}{n!} x F(-n; \frac{3}{2}; x^2). \tag{10}$$

Maatrikselendi

$$x_{nm}^k = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* x^k \psi_m dx \tag{11}$$

arvutamisel valemiga (2) esitatud funktsioonide abil võib kasutada rekursioonivalemeid (6) koos ortogonaalsusetingimusega (7) või ositi integreerimist. Olgu konkreetsuse mõttes $n \leq m$. Siis asendame integraalis (11) H_n vastavalt valemile (4) ja H_m vastavalt valemile (3) ning integreerime ositi m korda. Siis

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} x^k \mathcal{H}_m(x) \mathcal{H}_n(x) = \\ & = (-1)^m \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{d^m}{dx^m} (e^{-x^2}) \left[x^k (2^n x^n - 2^{n-1} \binom{n}{2} x^{n-2} + \dots) \right] = \\ & = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} \frac{d^m}{dx^m} \left[2^n x^{n+k} - 2^{n-1} \binom{n}{2} x^{n+k-2} + \dots \right]. \end{aligned}$$

(12)

Avaldises (12) tuleb arvestada ainult p esimest liiget, kus $k+n-2(p-1) \geq m$.

Näiteks, kui $k=1$, siis piisab esimesest liikmest $H_n(x)$ avaldises ($m \geq n+1$):

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx x e^{-x^2} \mathcal{H}_n(x) \mathcal{H}_m(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} \frac{d^m}{dx^m} \left[2^n x^{n+1} - \dots \right] = \\ &= \begin{cases} 2^n (n+1)! \sqrt{\pi} & , \text{ kui } m = n+1, \\ 0 & , \text{ kui } m > n+1. \end{cases} \end{aligned}$$

$H_n(x)$ on paaris või paaritu funktsioon, olenevalt sellest, kas n on paaris või paaritu.

Seetõttu on integraal $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* x^k \psi_m dx$ nullist eri-

nev vaid siis, kui $n + m + k$ on paarisarv.

Paarisarvulise k korral, $k = 2p$, saame ositi integreerides

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} x^{2p} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left(-\frac{1}{2} \frac{d}{dx} e^{-x^2}\right) x^{2p-1} dx = \quad (13)$$

$$= \frac{(2p-1)!!}{2^p} \sqrt{\pi},$$

kuna $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}$.

Kui $k < 0$, s. t. $k \rightarrow -k$ siis integraalis (12)

tuleb arvestada polünoomi H_n madalaimat järku liikmeid, mille korrutamisel x^{-k} -ga saame veel negatiivsed astmed. Nendele vastavad tuletised $\frac{d^m}{dx^m}$ on nullist erinevad.

Integraalis $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} x^{2p} dx$ diferentseerime nüüd esimest ja integreerime teist tegurit, s. o.

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} x^{2p} dx = -\frac{1}{2p-1} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d}{dx} x^{-2p+1}\right) e^{-x^2} dx = \quad (14)$$

$$= (-1)^p \frac{2^p}{(2p-1)!!} \sqrt{\pi}.$$

2. Kõdunud hüpergeomeetriline funktsioon.

Võrrandi

$$xy'' + (\gamma - x)y' - \alpha y = 0 \quad (15)$$

üldlahendiks on funktsioon

$$y = C_1 F(\alpha; \gamma; x) + C_2 x^{1-\gamma} F(\alpha - \gamma + 1; 2 - \gamma; x), \quad (16)$$

kus

$$F(\alpha; \gamma; x) = 1 + \frac{\alpha}{\gamma} \frac{x}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\gamma(\gamma+1)} \frac{x^2}{2!} + \dots, \\ \gamma \neq 0, -1, -2, \dots \quad (17)$$

Teine erilahend avaldises (16) on singulaarne punktis $x = 0$.

Täisarvulise γ korral pole saadud erilahendid lineaarselt sõltumatud ja võib piirduda ainult ühega neist.

Erinevate parameetrite väärtustega funktsioonide vahel on järgmised seosed:

$$F(\alpha; \gamma; x) = e^x F(\gamma - \alpha; \gamma; -x); \\ \frac{x}{\gamma} F(\alpha+1; \gamma+1; x) = F(\alpha+1; \gamma; x) - F(\alpha; \gamma; x); \\ \alpha F(\alpha+1; \gamma+1; x) = (\alpha - \gamma) F(\alpha; \gamma+1; x) + \gamma F(\alpha; \gamma; x); \\ \alpha F(\alpha+1; \gamma; x) = \\ = (x - 2\alpha - \gamma) F(\alpha; \gamma; x) + (\gamma - \alpha) F(\alpha-1; \gamma; x). \quad (18)$$

$$\frac{dF(\alpha; \gamma; x)}{dx} = \frac{\alpha}{\gamma} F(\alpha+1; \gamma+1; x); \\ F(\alpha; \alpha; x) = e^x. \quad (19)$$

$$F(\alpha; \gamma; x) = \frac{d}{d\alpha} [F(\alpha; \gamma; x) - F(\alpha-1; \gamma; x)]. \quad (20)$$

Funktsioonil $F(\alpha; \gamma; x)$ on suurte x väärtuste korral järgmine asümptootiline kuju

$$F(\alpha; \gamma; x) \sim \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma-\alpha)} (-x)^{-\alpha} G(\alpha, \alpha-\gamma+1; -x) + \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)} x^\alpha x^{\alpha-\gamma} G(\gamma-\alpha, 1-\alpha; x), \quad (21)$$

kus

$$G(\alpha, \beta; x) = 1 + \frac{\alpha\beta}{1!x} + \frac{\alpha(\alpha+1)\beta(\beta+1)}{2!x^2} + \dots \quad (22)$$

Kui $\alpha = -n$, taandub kõdunud hüpergeomeetriline funktsioon polünoomiks.

$F(-n; \gamma; x)$ on seotud Laguerre'i polünoomidega $L_n^{(\gamma)}$ järgmiselt

$$L_n^{(\gamma)}(x) = (\gamma+1)(\gamma+2) \dots (\gamma+n) F(-n; \gamma+1; x). \quad (23)$$

Kõdunud hüpergeomeetrilise funktsiooni võib saada hüpergeomeetrilisest funktsioonist $F(\alpha, \beta; \gamma; x)$ järgmise piirprotsessina

$$F(\alpha; \gamma; x) = \lim_{\beta \rightarrow \infty} (\alpha, \beta; \gamma; \frac{x}{\beta}). \quad (24)$$

Funktsioon $F(\alpha, \beta; \gamma; x)$ on võrrandi

$$x(1-x)y'' + [\gamma - (\alpha + \beta + 1)x]y' - \alpha\beta xy = 0 \quad (25)$$

üks erilahend ning on esitatav reana

$$F(\alpha, \beta; \gamma; x) = 1 + \frac{\alpha\beta}{\gamma} \frac{x}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)\beta(\beta+1)}{\gamma(\gamma+1)} \frac{x^2}{2!} + \dots \quad (26)$$

Ülesannete lahendamisel on otstarbekas teada järgmisi integraale

$$J_1 = \int_0^{\infty} e^{-\lambda x} x^{\nu} F(\alpha; \gamma; \kappa x) dx = \\ = \Gamma(\nu+1) \lambda^{-\nu-1} F(\alpha, \nu+1; \gamma; \frac{\kappa}{\lambda}), \quad (27)$$

kui $\operatorname{Re} \nu > -1$; $\operatorname{Re} \lambda > |\operatorname{Re} \kappa|$;

$$J_2 = \int_0^{\infty} e^{-\kappa x} x^{\nu-1} [F(-n; \gamma; \kappa x)]^2 dx = \\ = \frac{\Gamma(\nu) n!}{\kappa^{\nu} \gamma(\gamma+1) \dots (\gamma+n-1)} \left\{ 1 + \frac{n(\gamma-\nu-1)(\gamma-\nu)}{1^2 \cdot \gamma} + \right. \\ + \frac{n(n-1)(\gamma-\nu-2)(\gamma-\nu-1)(\gamma-\nu)(\gamma-\nu+1)}{1^2 \cdot 2^2 \cdot \gamma(\gamma+1)} + \dots + \\ \left. + \frac{n(n-1) \dots 1 \cdot (\gamma-\nu-n) \dots (\gamma-\nu+n-1)}{1^2 \dots n^2 \gamma(\gamma+1) \dots (\gamma+n-1)} \right\}, \quad (28)$$

kus n on täisarv, $\operatorname{Re} \nu > 0$;

$$J_3 = \int_0^{\infty} e^{-\lambda x} x^{\gamma-1} F(\alpha; \gamma; \kappa x) F(\alpha'; \gamma; \kappa' x) dx = \\ = \Gamma(\gamma) \lambda^{\alpha+\alpha'-\gamma} (\lambda-\kappa)^{-\alpha} (\lambda-\kappa')^{-\alpha'} F(\alpha, \alpha'; \gamma; \frac{\kappa \kappa'}{(\lambda-\kappa)(\lambda-\kappa')}), \\ \operatorname{Re}(\gamma) > 0, \operatorname{Re}(\lambda) > \operatorname{Re}(\kappa) + \operatorname{Re}(\kappa'). \quad (29)$$

Γ -funktsiooni puhul on sobiv silmas pidada järgmisi omadusi:

$$\Gamma(z+1) = z \Gamma(z); \Gamma(z) \Gamma(1-z) = \frac{\sqrt{\pi}}{z \sin \pi z}. \quad (30)$$

$$\Gamma(1) = \Gamma(2) = 1; \quad \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}; \quad \Gamma\left(-\frac{1}{2}\right) = -2\sqrt{\pi};$$

$$\Gamma(n+1) = n! \quad (n \text{ on naturaalarv});$$

$$\Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2^n} (2n-1)!!; \quad (31)$$

$$\psi(x) \equiv \frac{d}{dx} \ln \Gamma(x) = -C - \frac{1}{x} + x \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k(x+k)};$$

$$C = -\psi(1) \quad \text{nimetatakse Euleri konstandiks, } C \approx 0,577.$$

3. Laguerre'i polünoomid.

Vesinikusarnase aatomi diskreetsele energiaspektrile vastavad omafunktsioonid avalduvad sfäärilistes koordinaatides kujul $\psi_{n, \ell, m}(r, \vartheta, \varphi) =$

$$= N_{n\ell} \rho^{\ell} e^{-\frac{\rho}{a}} L_{n-\ell-1}^{(2\ell+1)}(\rho) P_{\ell}^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}, \quad (32)$$

kus $\rho = \frac{2Zr}{na}$, $L_n^{(p)}$ on Laguerre'i polünoom ja $P_{\ell}^m(\cos \vartheta)$ Legendre'i kaaspolünoom.

Polünoomid $L_n^{(p)}(x)$ on arvutatavad järgmise valemi abil

$$L_n^{(p)}(x) = x^{-p} e^x \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^{n+p}); \quad (33)$$

$$L_n^{(p)}(x) = \sum_{k=0}^n (-1)^k \binom{n+p}{n-k} n(n-1)(n-2)\dots(k+1)x^k. \quad (34)$$

Erinevate indeksitega polünoomide vahel kehtivad järgmised rekurrentsed seosed

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} L_n^{(p)}(x) &= -n L_{n-1}^{(p+1)}(x); \\ x L_n^{(p)}(x) &= (n+p) L_n^{(p-1)}(x) - L_{n+1}^{(p-1)}(x); \\ L_n^{(p-1)}(x) &= L_n^{(p)}(x) - n L_{n-1}^{(p)}(x); \\ n^2(n-1) L_n^{(p)}(x) &= (n-1)(-x+2n+p-1) L_{n-1}^{(p)}(x) - \\ &- (n+p-1) L_{n-2}^{(p)}(x); \quad n = 2, 3, 4, \dots \end{aligned} \quad (35)$$

Laguerre'i polünoomid rahuldavad järgmist ortogonaalsu-
setingimust

$$\int_0^{\infty} e^{-x} x^p L_n^{(p)}(x) L_m^{(p)}(x) dx = n! \Gamma(p+n+1) \delta_{nm} \quad (36)$$

ja diferentsiaalvõrrandid

$$x y'' + (p-x+1) y' + n y = 0. \quad (37)$$

Maatrikselomentide ja keskväärtuste arvutamisel näiteks
vesinikusarnase aatomi korral võib kasutada $L_n^{(p)}(x)$ seost
vastava kõdunud hüpergeomeetrilise funktsiooniga ja seejärel
valemeid (27, 28). Võib aga kasutada otseselt ositi integ-
reerimise meetodit, mis oli kirjeldatud punktis 1.

Näiteks integraali

$$J = \int_0^{\infty} e^{-x} x^{k+p+1} L_n^{(p)}(x) L_m^{(p)}(x) dx$$

arvutamisel asendame $L_n^{(p)}(x)$ vastavalt valemile (33) ja

$L_m^{(p)}(x)$ vastavalt valemile (34), kui $n \geq m$. Saame

$$\begin{aligned} J &= \int_0^{\infty} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^{n+p}) x^{k+1} L_m^{(p)}(x) dx = \\ &= (-1)^n \int_0^{\infty} e^{-x} x^{n+p} \frac{d^n}{dx^n} [x^{k+1} L_m^{(p)}(x)] dx. \end{aligned} \quad (38)$$

Kui $k \geq -1$, on $x^{k+1} L_m^{(p)}$ avaldises kõik x astmed mittenegatiivsed ning n -kordse diferentseerimise puhul anavad nullist erineva tulemuse ainult kõrgeimat järku liikmed:

$$x^{k+1} L_m^{(p)}(x) = C_0 x^{m+k+1} + C_1 x^{m+k} + \dots + C_k x^m, \quad (39)$$

kus kordajad C_0, C_1, \dots, C_k on leitavad valemist (34):

$$C_0 = (-1)^m, C_1 = (-1)^{m-1} m(m+p), \dots$$

Kui $k < -1$, siis asendame valemis (38) $k \rightarrow -k$, saame

$$J_1 = (-1)^n \int_0^{\infty} e^{-x} x^{n+p} \frac{d^n}{dx^n} [x^{-k+1} L_m^{(p)}(x)] dx. \quad (40)$$

Siis $x^{-k+1} L_m^{(p)}(x)$ avaldises tarvitseb diferentseerimise puhul ($n \geq m$) säilitada ainult x negatiivsed astmed, s. o.

$$x^{-k+1} L_m^{(p)}(x) = d_1 x^{-k+1} + d_2 x^{-k+2} + \dots + d_{k-2} x^{-1}, \quad (41)$$

kus valem (39) põhjal

$$\begin{aligned} d_1 &= (p+1)(p+2)\dots(p+m-1)(p+m); \\ d_2 &= (-1)^m (p+2)(p+3)\dots(p+m); \\ &\dots \end{aligned} \quad (42)$$

Lõpptulemusena taandub integraali J arvutamine integraali J' arvutamiseks, kus J' on järgmist tüüpi:

$$J' = \int_0^{\infty} e^{-x} x^s dx = s!, \quad s \geq 0. \quad (43)$$

(Viimase tulemuse saame ositi integreerides).

Integraal J_1 ei hajju, kui $p - k + 1 \geq 0$.

Vesinikusarnase aatomi korral taandub näiteks raadiuse mitmesuguste astmete n^k keskvaartuse arvutamine järgmiste integraalide arvutamiseks

$$\overline{n^k} = \int_0^{\infty} n^{k+2} R_{nl}^2 dr, \quad (45)$$

$$\text{kus } R_{nl}(r) = \frac{2}{n^2} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \frac{\rho^{\ell} e^{-\frac{\rho}{a}}}{\sqrt{(n+\ell)!(n-\ell-1)!}} L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(\rho),$$

$$\rho = \frac{Zr}{na}, \quad a \text{ on Bohri raadius.} \quad (46)$$

Kasutades eespool antud retsepti, saame näiteks

$$\overline{n_1} = \frac{1}{2} [3n^2 - \ell(\ell+1)];$$

$$\overline{n_1^2} = \frac{n^2}{2} [5n^2 + 1 - 3\ell(\ell+1)];$$

$$\overline{n_1^{-1}} = n^{-2}; \quad (47)$$

$$\overline{n_1^{-2}} = [n^3(\ell + \frac{1}{2})]^{-1}; \quad n_1 = \frac{Zr}{a}.$$

Mõnedes käsiraamatutes defineeritakse Laguerre'i polünoomid $\overline{L_n^{(r)}}(x)$ kujul:

$$\overline{L_n^{(r)}}(x) = \frac{d^r}{dx^r} L_n(x); \quad L_n(x) = e^x \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^n). \quad (48)$$

Valemitega (33) ja (48) defineeritud funktsioonid $\overline{L_n^{(r)}}(x)$ ja $\overline{L_n^{(p)}}(x)$ on omavahel seotud järgmiselt

$$\overline{L_n^{(p)}}(x) = \frac{n!}{(n-p)!} \overline{L_{n-p}^{(p)}}(x). \quad (49)$$

Funktsioonide $\overline{L_n^{(p)}}$ kaudu avaldub vesinikusarnase aatomi energia omafunktsioonide radiaalosa järgmiselt:

$$R_{n\ell}(r) = -\left(\frac{r}{a}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-\ell-1)!}{[(n+\ell)!]^3}} \rho^\ell e^{-\frac{\rho}{2}} L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho). \quad (50)$$

Lõpuks esitame tabeli esimeste normeeritud omafunktsioonide

$R_{n\ell}$ jaoks, kus $R_{n\ell}$ rahuldavad tingimust $\int_0^\infty r_1^2 R_{n\ell}^2(r_1) dr_1 = 1$.

$$R_{10} = 2 e^{-r_1};$$

$$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{1}{2} r_1\right) e^{-\frac{1}{2} r_1};$$

$$R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6}} r_1 e^{-\frac{1}{2} r_1};$$

$$R_{30} = \frac{2}{3\sqrt{3}} \left(1 - \frac{2}{3} r_1 + \frac{2}{27} r_1^2\right) e^{-\frac{1}{3} r_1};$$

$$R_{31} = \frac{8}{27\sqrt{6}} r_1 \left(1 - \frac{1}{6} r_1\right) e^{-\frac{1}{3} r_1};$$

$$R_{32} = \frac{4}{81\sqrt{30}} r_1^2 e^{-\frac{1}{3} r_1};$$

$$R_{40} = \frac{1}{4} \left(1 - \frac{3}{4} r_1 + \frac{1}{8} r_1^2 - \frac{1}{192} r_1^3\right) e^{-\frac{1}{4} r_1};$$

$$R_{41} = \frac{1}{16} \sqrt{\frac{5}{3}} r_1 \left(1 - \frac{1}{4} r_1 + \frac{1}{80} r_1^2\right) e^{-\frac{1}{4} r_1};$$

$$R_{42} = \frac{1}{64\sqrt{5}} r_1^2 \left(1 - \frac{1}{12} r_1\right) e^{-\frac{1}{4} r_1};$$

$$R_{43} = \frac{1}{768\sqrt{35}} r_1^3 e^{-\frac{1}{4} r_1}.$$

Suurte peakvantarvu n väärtuste korral on funktsioonidel järgmine asümptootiline kuju:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{3/2} R_{nl}(a_1) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} J_{2l+1}(\sqrt{8n_1}).$$

4. Sfäärilised funktsioonid ja Legendre'i
kaaspolünoomid.

Sfäärilised funktsioonid $Y_l^m(\vartheta, \varphi) = P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}$
on orbitaalse impulssmomendi ruudu operaatori omafunktsioo-
nid omaväärtustega $\hbar l(l+1)$.

Sfääriliste funktsioonide avaldises esinevad Legendre'i
kaaspolünoomid on defineeritud valemiga

$$P_l^m(x) = (-1)^m (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x), \quad (51)$$

kus

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

$$P_l^{-m}(x) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(x). \quad (52)$$

Funktsioonid $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$ rahuldavad diferentsiaalvõr-
randit

$$[\Delta_{(\vartheta, \varphi)} + l(l+1)] Y_l^m(\vartheta, \varphi) = 0, \quad (53)$$

$$\Delta_{(\vartheta, \varphi)} = \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2},$$

ja ortogonaalsusetingimusi

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_l^m(\vartheta, \varphi) Y_{l'}^{m'}(\vartheta, \varphi) \sin \vartheta d\vartheta d\varphi =$$

$$= \delta_{mm'} \delta_{ll'} \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}. \quad (54)$$

Polünoomid $P_\ell^m(x)$ on avaldatavad hüpergeomeetrilise funktsiooni $F(\alpha, \beta; \gamma; x)$ kaudu:

$$P_\ell^m(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} F(\ell+1, -\ell; 1; \frac{1-x}{2}) \quad (58)$$

ja rahuldavad diferentsiaalvõrrandit

$$\frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{dP_\ell^m(x)}{dx} \right] + \left[\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] P_\ell^m(x) = 0; \quad (59)$$

$$-1 \leq x \leq +1.$$

Normeerimata Legendre'i kaaspolünoomide vahel kehtivad seosed

$$\begin{aligned} (2\ell+1) \sin^m \nu P_\ell^m(\cos \nu) &= P_{\ell+1}^{m+1} - P_{\ell-1}^{m+1} = \\ &= -(\ell-m+1)(\ell-m+2) P_{\ell+1}^{m-1} + (\ell+m)(\ell+m-1) P_{\ell-1}^{m-1}; \end{aligned} \quad (57')$$

$$\begin{aligned} (2\ell+1) \cos^m \nu P_\ell^m(\cos \nu) &= (\ell-m+1) P_{\ell+1}^m + \\ &+ (\ell+m) P_{\ell-1}^m, \end{aligned}$$

mida koos ortogonaalsusetingimusega (54) on otstarbekas silmas pidada maatrikselementide arvutamisel ja valikureeglite leidmisel.

5. Besseli funktsioonid.

Besseli diferentsiaalvõrrandi

$$x^2 y'' + x y' + (x^2 - \nu^2) y = 0 \quad (60)$$

üldlahendi Z_ν võime esitada järgmiselt:

a) kui ν ei ole täisarv, siis

$$Z_\nu(x) = C_1 J_\nu(x) + C_2 J_{-\nu}(x); \quad (61_1)$$

b) kui ν on mistahes mittenegatiivne arv, siis

$$Z_\nu(x) = C_1 J_\nu(x) + C_2 N_\nu(x) \quad (61_2)$$

või

$$Z_\nu(x) = C_1 \mathcal{H}_\nu^{(1)}(x) + C_2 \mathcal{H}_\nu^{(2)}(x), \quad (61_3)$$

kus C_1 ja C_2 on meelevaldsed konstandid.

Valemities (61) esinevad silindrilised funktsioonid on defineeritud järgmiselt.

Esimest liiki Besseli funktsioon $J_\nu(x)$ ($\nu \geq 0$) on esitatav reana

$$J_\nu(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k! \Gamma(\nu+k+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{\nu+2k} \quad (62)$$

ning on ainus nullpunktis ($x = 0$) regulaarne Besseli võrrandi lahend.

Kui ν ei ole täisarvuline, on funktsioon $J_{-\nu}(x)$

$$J_{-\nu}(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k! \Gamma(-\nu+k+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{-\nu+2k} \quad (63)$$

funktsioonist $J_\nu(x)$ lineaarselt sõltumatu.

Kui ν on täisarvuline, $\nu = n$, siis $J_{-n}(x) = (-1)^n J_n(x)$.

Mittetäisarvulise ν korral defineeritakse Neumann'i funktsioon $N_\nu(x)$ valemiga

$$N_\nu(x) = \frac{1}{\sin \nu \pi} [\cos \nu \pi J_\nu(x) - J_{-\nu}(x)], \quad (64)$$

mis piirjuhul $\nu \rightarrow n$ taandub valemiks

$$N_n(x) = \frac{1}{\pi} \left\{ 2J_n(x) \ln \frac{x}{2} - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (x/2)^{n+2k}}{k!(n+k)!} [\psi(k+n) + \psi(k)] - \sum_{r=0}^{n-1} \frac{(n-r-1)!}{x^{n+2r} r!} x^{-n+2r} \right\} \quad (65)$$

kus $\psi(k) = -C + \frac{1}{1} + \frac{1}{2} + \dots + \frac{1}{k-1}$
 $(C = -\psi(1) = 0,577).$

Hankeli funktsioonid $\mathcal{H}_\nu^{(1)}(x)$ ja $\mathcal{H}_\nu^{(2)}(x)$ on esitatavad Besseli ja Neumanni funktsioonide kaudu järgmiselt

$$\mathcal{H}_\nu^{(1)}(x) = J_\nu(x) + i N_\nu(x); \quad (66)$$

$$\mathcal{H}_\nu^{(2)}(x) = J_\nu(x) - i N_\nu(x).$$

Silindriliste funktsioonide kaudu avaldub ka võrrandi

$$y'' + Bxy = 0 \quad (67)$$

lahend:

$$y = \sqrt{i} Z_{\frac{1}{3}} \left(\frac{2}{3} \sqrt{B} x^{\frac{3}{2}} \right). \quad (68)$$

Võrrand (67) esineb näiteks homogeenses raskusväljas viibiva osakese energia omaväärtusprobleemis.

Modifitseeritud Besseli võrrandi

$$x^2 y'' + x y' - (x^2 - \nu^2) y = 0 \quad (69)$$

üldlahendiks on

$$y = C_1 I_\nu(x) + C_2 K_\nu(x), \quad (70)$$

kus

$$I_\nu(x) = e^{-i \frac{\nu\pi}{2}} J_\nu(ix), \quad (71)$$

$$K_\nu(x) = \frac{\pi}{2 \sin \nu \pi} [I_{-\nu}(x) - I_\nu(x)]. \quad (72)$$

Besseli funktsioonide vahel kehtivad järgmised funktsionaalsed seosed:

$$\begin{aligned} Z_{\nu-1}(x) + Z_{\nu+1}(x) &= \frac{2\nu}{x} Z_\nu(x); \\ Z_{\nu-1}(x) - Z_{\nu+1}(x) &= 2 \frac{dZ_\nu}{dx}; \end{aligned} \quad (73)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx}\right)^m [x^\nu Z_\nu(x)] &= x^{\nu-m} Z_{\nu-m}(x); \\ \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx}\right)^m [x^{-\nu} Z_\nu(x)] &= (-1)^m x^{-\nu-m} Z_{\nu+m}(x), \end{aligned} \quad (74)$$

kus Z_ν on J_ν või N_ν või nende linearkombinatsioon.

Analoogiliselt

$$\begin{aligned} I_{\nu-1}(x) - I_{\nu+1}(x) &= \frac{2\nu}{x} I_\nu(x); \\ I_{\nu-1}(x) + I_{\nu+1}(x) &= 2 \frac{dI_\nu}{dx}; \end{aligned} \quad (75)$$

$$\begin{aligned} K_{\nu-1}(x) - K_{\nu+1}(x) &= -\frac{2\nu}{x} K_\nu(x); \\ K_{\nu-1}(x) + K_{\nu+1}(x) &= -2 \frac{dK_\nu}{dx}. \end{aligned} \quad (76)$$

Poolearvulise indeksiga Besseli funktsioonid avalduvad elementaarsete funktsioonide kaudu, näiteks

$$\begin{aligned} J_{\frac{1}{2}}(x) &= \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sin x; \quad J_{-\frac{1}{2}}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos x; \\ J_{\frac{3}{2}}(x) &= \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \left(\frac{\sin x}{x} - \cos x \right); \\ J_{-\frac{3}{2}}(x) &= \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \left(-\sin x - \frac{\cos x}{x} \right); \end{aligned} \quad (77)$$

$$N_\nu(x) = (-1)^{n+1} J_{-\nu}(x), \text{ kui } \nu = n + \frac{1}{2}.$$

Antud füüsikalistele tingimustele vastava lahendi leidmisel üldlahendist on sageli vaja teada Besseli funktsioonide asümptootilisi avaldisi.

Funktsioonide $I_{\pm \frac{1}{2}}(x)$ jaoks on vastavad valemid toodud lisa A (val. (59)).

a) Asümptootilised avaldised $J_\nu(x)$ jaoks.

Kui $x \rightarrow 0$:

$$\begin{aligned} J_0(x) &= 1 - \frac{1}{4!} \left(\frac{x}{2}\right)^2 + \frac{1}{(2!)^2} \left(\frac{x}{4}\right)^2 - \dots ; \\ J_1(x) &= \frac{x}{2} \left[1 - \frac{1}{1 \cdot 2} \left(\frac{x}{2}\right)^2 + \frac{1}{1 \cdot 2 \cdot 2 \cdot 3} \left(\frac{x}{2}\right)^4 - \dots \right] ; \\ &\dots \dots \dots \\ J_\nu(x) &= \left(\frac{x}{2}\right)^\nu \frac{1}{\Gamma(\nu+1)} - \dots ; \end{aligned} \quad (78)$$

kui $x \rightarrow +\infty$:

$$\begin{aligned} J_0(x) &= \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos\left(x - \frac{\pi}{4}\right) + \dots ; \\ J_1(x) &= \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sin\left(x - \frac{\pi}{4}\right) + \dots ; \\ &\dots \dots \dots \\ J_\nu(x) &= \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos\left(x - \frac{\pi}{2} \nu - \frac{\pi}{4}\right) + \dots \end{aligned}$$

b) Asümptootilised avaldised $N_\nu(x)$ jaoks.

Kui $x \rightarrow 0$:

$$\begin{aligned} N_0(x) &= \frac{2}{\pi} J_0(x) \left(\ln \frac{x}{2} + C\right) + \frac{2}{\pi} \left(\frac{x}{2}\right)^2 + \dots ; \\ N_1(x) &= -\frac{2}{\pi x} + \frac{2}{\pi} J_1(x) \left[\ln \frac{x}{2} + C\right] + \dots ; \\ &\dots \dots \dots \\ N_n(x) &= -\frac{1}{\pi} \left(\frac{2}{x}\right)^n (n-1)! + \dots, \quad (n > 1). \end{aligned} \quad (79)$$

Kui $x \rightarrow +\infty$:

$$\begin{aligned} N_0(x) &= \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sin\left(x - \frac{\pi}{4}\right) + \dots ; \\ N_1(x) &= -\sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos\left(x - \frac{\pi}{4}\right) + \dots ; \\ &\dots \dots \dots \\ N_n(x) &= \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sin\left(x - n \frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) + \dots \end{aligned}$$

c) Hankeli funktsioonide asümptootiline kuju,

kui $x \rightarrow \infty$:

$$\mathcal{H}_\nu^{(1)}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} e^{i(x - \frac{\pi}{2}\nu - \frac{\pi}{4})} + \dots,$$

$$\mathcal{H}_\nu^{(2)}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} e^{-i(x - \frac{\pi}{2}\nu - \frac{\pi}{4})} + \dots.$$

(80)

d) Funktsioonide $I_\nu(x)$ ja $\mathcal{K}_\nu(x)$ asümptootilised avaldised.

Kui $x \rightarrow 0$:

$$I_0(x) \equiv J_0(ix) = 1 + \frac{1}{4!} \left(\frac{x}{2}\right)^2 + \frac{1}{(2!)^2} \left(\frac{x}{2}\right)^4 + \dots;$$

$$I_1(x) \equiv -i J_1(ix) = \frac{x}{2} \left[1 + \frac{1}{4 \cdot 2} \left(\frac{x}{2}\right)^2 + \frac{-1}{1 \cdot 2 \cdot 2 \cdot 3} \left(\frac{x}{2}\right)^4 + \dots \right];$$

$$I_\nu(x) \equiv (-i)^\nu J_\nu(ix) = \left(\frac{x}{2}\right)^\nu \frac{1}{\Gamma(\nu+1)} + \dots;$$

$$\mathcal{K}_0(x) \equiv \frac{\pi}{2} i \mathcal{H}_0^{(1)}(ix) = -(\ln \frac{x}{2} + c) I_0(x) + \left(\frac{x}{2}\right)^2 + \dots;$$

$$\mathcal{K}_n(x) = \frac{(n-1)!}{2} \left(\frac{2}{x}\right)^n + \dots = \frac{\pi}{2} i e^{i\pi \frac{n}{2}} \mathcal{H}_n^{(1)}(ix).$$

(81)

Kui $x \rightarrow \infty$:

$$I_0(x) = \sqrt{\frac{1}{2\pi x}} e^x + \dots;$$

$$I_1(x) = \sqrt{\frac{1}{2\pi x}} e^x + \dots;$$

$$I_\nu(x) = \sqrt{\frac{1}{2\pi x}} e^x + \dots;$$

$$\mathcal{K}_0(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} e^{-x} + \dots;$$

$$\mathcal{K}_1(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} e^{-x} + \dots;$$

$$\mathcal{K}_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} e^{-x} + \dots.$$

Suurema täpsuse, kui $x \rightarrow \infty$, annavad valemid:

$$J_\nu(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} [P_\nu \cos \varphi_\nu - Q_\nu \sin \varphi_\nu];$$

$$N_\nu(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} [P_\nu \sin \varphi_\nu + Q_\nu \cos \varphi_\nu];$$

$$\mathcal{H}_\nu^{(1)}(x) = e^{-i\frac{\pi}{2}(\nu+\frac{1}{2})} \sqrt{\frac{2}{\pi x}} e^{ix} S_\nu(-2ix);$$

$$\mathcal{H}_\nu^{(2)}(x) = e^{i\frac{\pi}{2}(\nu+\frac{1}{2})} \sqrt{\frac{2}{\pi x}} e^{-ix} S_\nu(2ix);$$

(82)

$$\varphi_\nu = x - \frac{2\nu+1}{4}\pi,$$

kus $S_\nu(2ix) = P_\nu(x) - iQ_\nu(x)$,

Q_ν ja P_ν on reaalsed,

$$S_\nu(z) = 1 + \frac{4\nu^2-1}{1! 4z} + \frac{(4\nu^2-1)(4\nu^2-9)}{2! (4z)^2} + \dots + \frac{(4\nu^2-1)(4\nu^2-9)(4\nu^2-25)}{3! (4z)^3} + \dots$$

(83)

Võrrandi

$$x^2 y'' + 2xy' + [x^2 - \nu(\nu+1)]y = 0$$

(84)

lahenditeks on funktsioonid

$$y = x^{-\frac{1}{2}} Z_{\nu+\frac{1}{2}}(x).$$

(85)

Kui kasutada tähistusi

$$\Psi_\nu^{(1)}(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{\nu+\frac{1}{2}}(x); \quad \Psi_\nu^{(2)}(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} N_{\nu+\frac{1}{2}}(x);$$

(86)

$$\Psi_\nu^{(3)}(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} \mathcal{H}_{\nu+\frac{1}{2}}^{(1)}(x); \quad \Psi_\nu^{(4)}(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} \mathcal{H}_{\nu+\frac{1}{2}}^{(2)}(x);$$

saame funktsioonidele $\Psi_\nu^{(s)}$ ($s = 1, 2, 3, 4$) järgmised rekursioonivalemid

$$\psi_{\nu-1}^{(5)} + \psi_{\nu+1}^{(5)} = \frac{2\nu+1}{x} \psi_{\nu}^{(5)}; \quad (87)$$

$$\nu \psi_{\nu-1}^{(5)} - (\nu+1) \psi_{\nu+1}^{(5)} = (2\nu+1) \frac{d\psi_{\nu}^{(5)}}{dx}.$$

Erijuhud on

$$\begin{aligned} \psi_0^{(1)}(x) &= \frac{\sin x}{x}; \quad \psi_{-1}^{(1)}(x) = \frac{\cos x}{x}; \\ \psi_0^{(3)}(x) &= -ix^{-1} e^{ix}; \quad \psi_{-1}^{(3)}(x) = x^{-1} e^{ix}; \\ \psi_0^{(4)}(x) &= ix^{-1} e^{-ix}; \quad \psi_{-1}^{(4)}(x) = x^{-1} e^{-ix}. \end{aligned} \quad (88)$$

Naturaalarvulise indeksi, $\nu = n = 1, 2, 3, \dots$ puhul saame üldiselt

$$\begin{aligned} \psi_n^{(1)}(x) &= x^n \left(-\frac{1}{x} \frac{d}{dx}\right)^n \frac{\sin x}{x}; \\ \psi_n^{(2)}(x) &= (-1)^{n+1} \psi_{n-1}^{(1)}(x). \end{aligned} \quad (89)$$

Kujule (84) taandub näiteks vaba osakese Schrödingeri võrrand radiaalmuutujast sõltuva funktsiooni jaoks, kui kasutada sfäärilisi koordinaate.

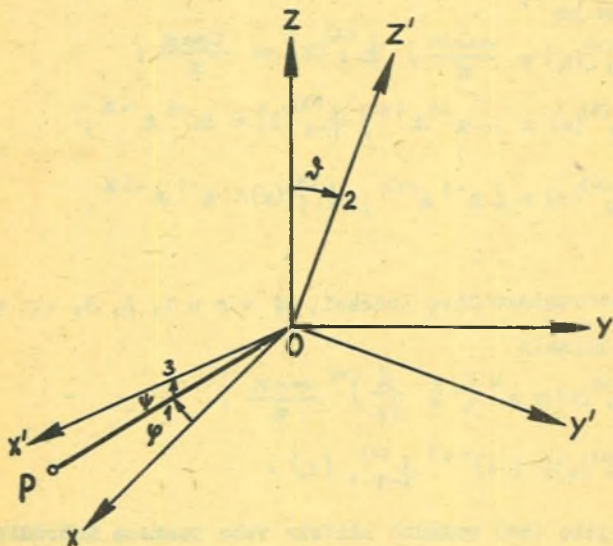
6. Spinori teisenemine koordinaattelgede pööramisel.

Iseloomustagu koordinaadistiku pööret Euleri nurgad φ , ψ ja χ (vt. joonis 11!).

I järku spinoriks nimetatakse 2-komponendilist suurust, mille komponendid üleminekul koordinaadistikust $(x, y, z) \rightarrow (x', y', z')$ teisenevad lineaarhomogeenselt:

$$x_{\mu}' = \sum_{\nu=1}^2 a_{\mu\nu} x_{\nu}, \quad \mu = 1, 2, \quad (90)$$

kus $a_{\mu\nu}$ on kahe rea ja veerulise unimodulaarse maatriksi elemendid. Fikseeritud nurkade φ , α , ψ korral võime maatriksi a esitada



Joon. 11.

$$a = \begin{pmatrix} e^{\frac{i}{2}(\varphi+\psi)} \cos \frac{\alpha}{2} & i e^{\frac{i}{2}(\varphi-\psi)} \sin \frac{\alpha}{2} \\ i e^{\frac{i}{2}(\varphi-\psi)} \sin \frac{\alpha}{2} & e^{-\frac{i}{2}(\varphi+\psi)} \cos \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix}. \quad (91)$$

Valemi (90) üldistuseks on k -ndat järku spinori $\chi_{\mu_1 \dots \mu_k}$ teisenemiseeskiri (k -ndat järku spinor on 2^k -komponendiline suurus):

$$\frac{1}{\mu_1 \dots \mu_k} = \sum_{\nu_1 \dots \nu_k=1}^2 a_{\mu_1 \nu_1} \dots a_{\mu_k \nu_k} x_{\nu_1} \dots x_{\nu_k},$$

($\mu_1, \dots, \mu_k = 1, 2$). (90')

Kui pöörde teostame mõnesuguse pöördetelje ümber, mille sihikoosinused tähistame vastavalt α , β , γ , ning kui pöördenurk on ϕ , siis suurused α , β , γ , ϕ on seotud Euleri nurkadega φ , ϑ , ψ järgmiste valemitega:

$$\begin{aligned} \cos \frac{\phi}{2} &= \cos \frac{\vartheta}{2} \cos \frac{\varphi+\psi}{2}; \\ \alpha \sin \frac{\phi}{2} &= \sin \frac{\vartheta}{2} \cos \frac{\varphi-\psi}{2}; \\ \beta \sin \frac{\phi}{2} &= \sin \frac{\vartheta}{2} \sin \frac{\varphi-\psi}{2}; \\ \gamma \sin \frac{\phi}{2} &= \cos \frac{\vartheta}{2} \sin \frac{\varphi+\psi}{2}. \end{aligned}$$

(92)

K i r j a n d u s .

1. Ландау Л., Лифшиц Е., Квантовая механика I, Физматгиз, Москва, 1963.
2. Шифф Л., Квантовая механика, ИЛ, Москва, 1957.
3. Гольдман И.И., Кривченков В.Д., Сборник задач по квантовой механике, Гостехиздат, Москва 1957.
4. Коган В., Галицкий В., Сборник задач по квантовой механике, Гостехиздат, Москва, 1956.
5. Основные формулы физики. Под редакцией Д.Мензеля, ИЛ, Москва, 1957.
6. Рыжик И.М., Градштейн И.С., Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений, Гостехиздат, Москва, 1951.

S i s u k o r d .

Eessõna.

Operaatorite üldised omadused. Määramatuse relatsioonid (ül. 1 - 21)	4
Statsionaarsed olekud. Potentsiaalbarjäärid (ül. 22 - 69)	12
Ajast sõltuv Schrödingeri võrrand. Heisenbergi esitus (ül. 70 - 76)	37
Statsionaarsete olekute määramine ligikaudsete meetoditega (ül. 77 - 92)	39
Üleminekutõenäosuste arvutamine (ül. 93 - 115)	47
Laetud osake magnetväljas (ül. 116 - 125)	61
Põrkeprobleemid (ül. 126 - 143)	66
Spin. Sümmeetriaküsimused (ül. 144 - 161)	76
Tuumamomendid, tuumareaktsioonid (ül. 162 - 181) ...	89
Pauli võrrand. Aatom. Molekul (ül. 182 - 200)	101
Lisa A. Kvantmehhaanika valemeid ja arvutusmeetodeid.	115
1. Operaatorid, nende omadused, mitmesugused esitused	115
2. Schrödingeri võrrand mitterelativistliku osakese jaoks	119
3. Schrödingeri võrrandi ligikaudse lahendamise meetodeid	127

4. Mittestatsionaarsete olekutega seotud lähendusmeetodid	138
5. Põrketeeooria valemeid ,.....	144
6. Kiirgusprobleem	152
7. Relativistlik elektron	155
8. Impulssmomentide liitmine jm. küsimused	160
Lisa B. Valemeid ja spetsiaalsete funktsioonide omadusi	167
1. Harmoonilise ostsillaatori omafunktsioonid ja Hermite'i polünoomid	167
2. Kõõdunud hüpergeomeetriline funktsioon	170
3. Laguerre'i polünoomid	174
4. Sfäärilised funktsioonid ja Legendre'i kaaspolünoomid	179
5. Besseili funktsioonid	181
6. Spinori teisenemine koordinaattelgede pöörämisel	188
Kirjandus	191