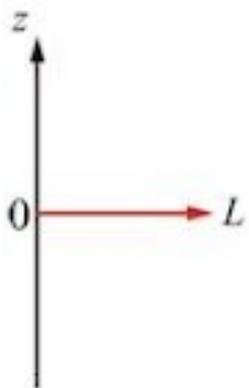


Момент импульса.

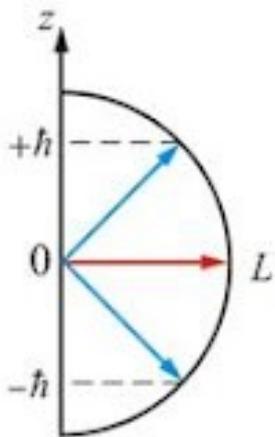


s-состояние

$$l = 0$$

$$m = 0$$

$$L_z = 0$$

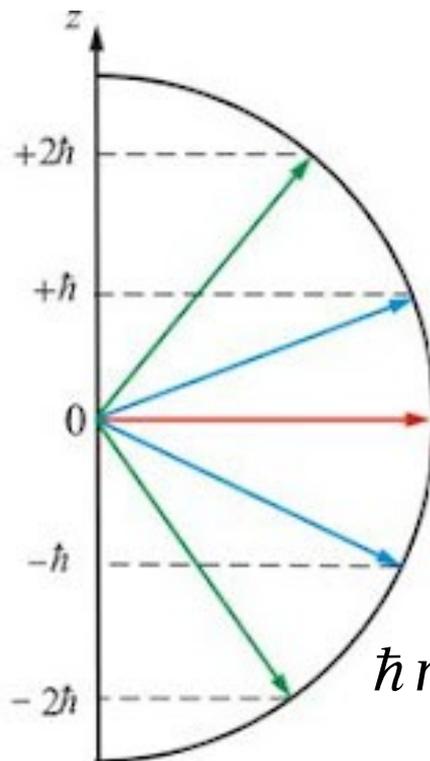


p-состояние

$$l = 1$$

$$m = 0, \pm 1$$

$$L_z = 0, \pm \hbar$$



d-состояние

$$l = 2$$

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

$$L_z = 0, \pm \hbar, \pm 2\hbar$$

оператор

$$\hat{l} = [\hat{r} \hat{p}]$$

Операторы и собственные значения одновременно определяемых величин

$$\hat{l}^2 = [\hat{r} \hat{p}]^2$$

$$\hbar^2 l(l+1), l=0, 1, 2, 3, \dots$$

$$\hat{l}_z = [\hat{r} \hat{p}]_z$$

$$\hbar m, m=0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \pm l$$

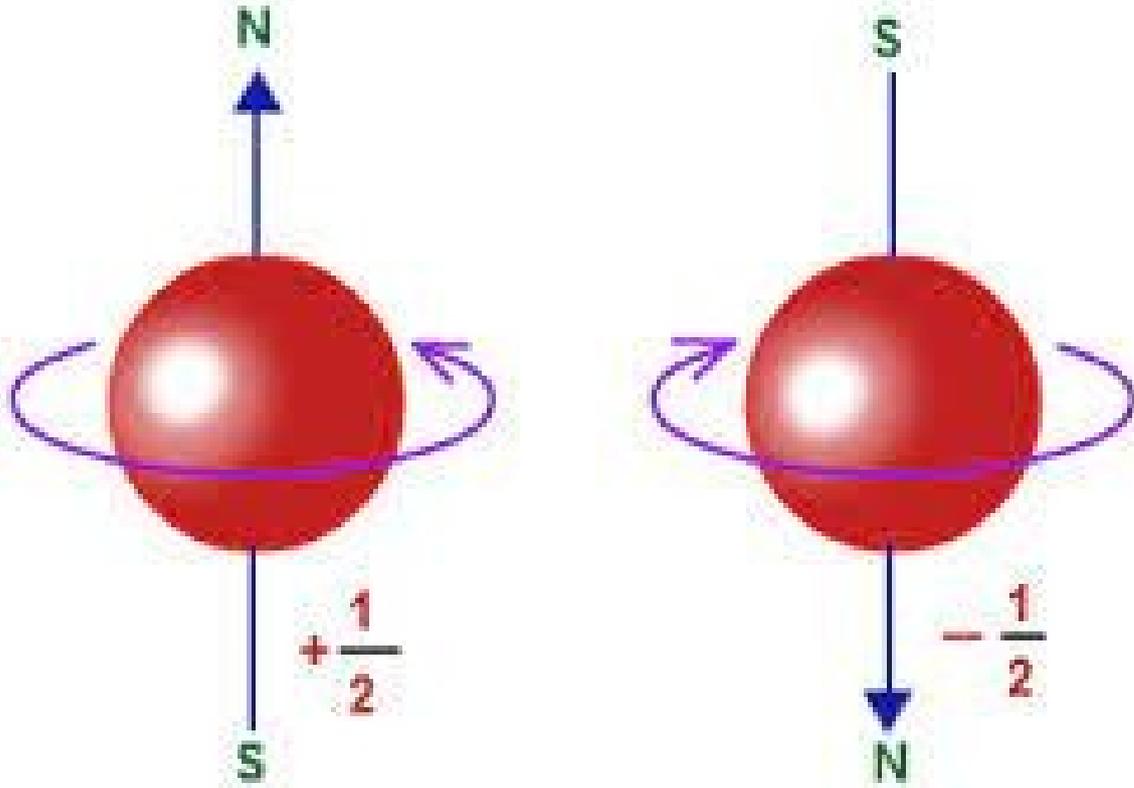
магнитный момент

$$\hat{\mu} = \mu_B \hat{l}$$

$$\mu_B = \frac{e}{2m}$$

Собственный механический момент - спин.

Свободный электрон



Одновременно определяемые величины и собственные значения

$$\hat{S}^2 \quad \hbar^2 s(s+1), s=1, 2, 3...$$
$$\hat{S}_z \quad \hbar s(s+1), s=1/2, 3/2, 5/2...$$

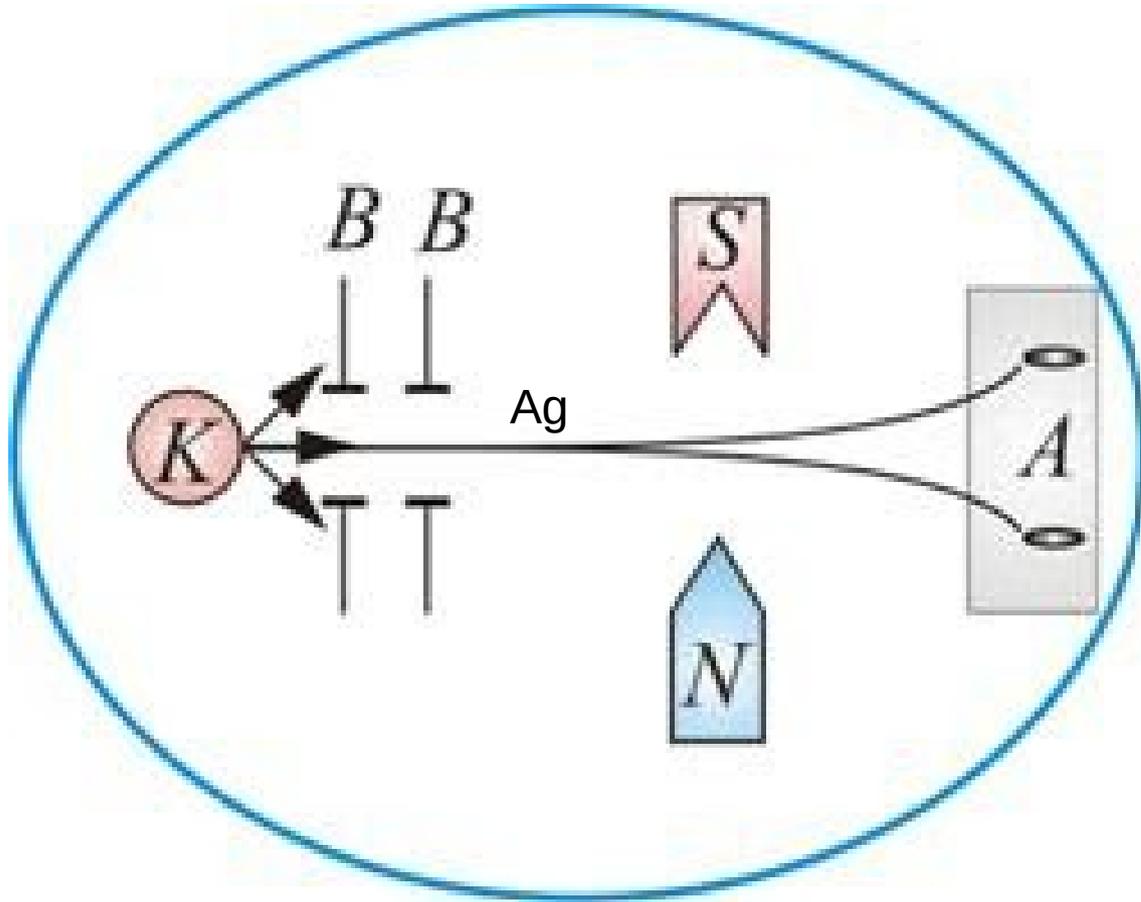
$$\hat{L}_z \quad \hbar m, m=0, \pm 1, \pm 2, \pm 3... \pm s$$
$$\hat{S}_z \quad \hbar m, m=\pm 1/2, \pm 3/2, \pm 5/2... \pm s$$

МАГНИТНЫЙ МОМЕНТ

$$\hat{\mu} = g \mu_B \hat{S}$$

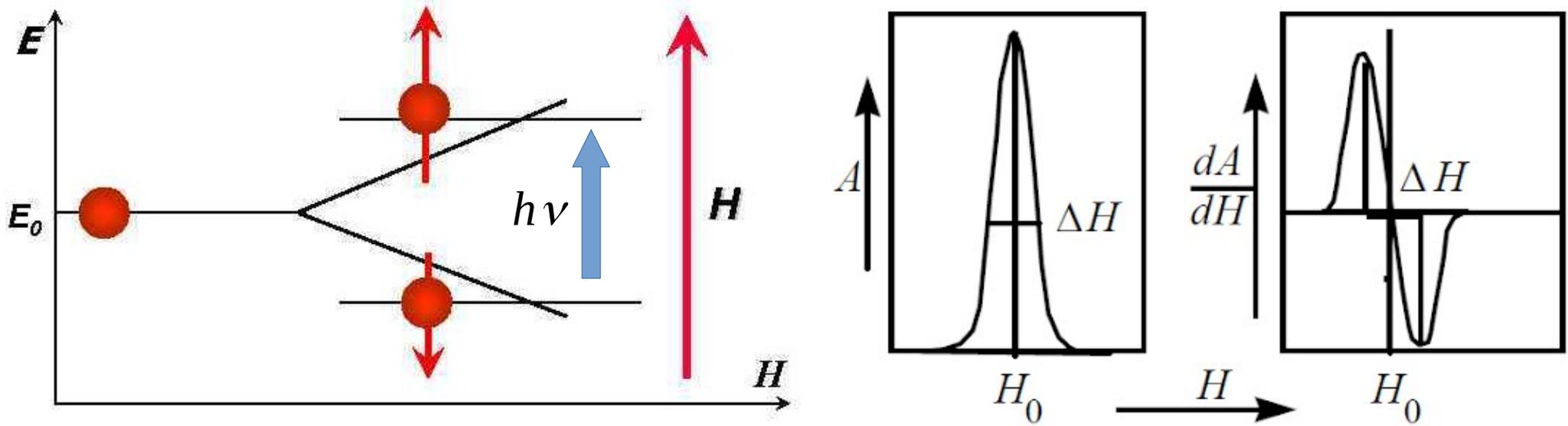
$$\mu_B = \frac{e \hbar}{2m}$$

Опыты Штерна-Герлаха.



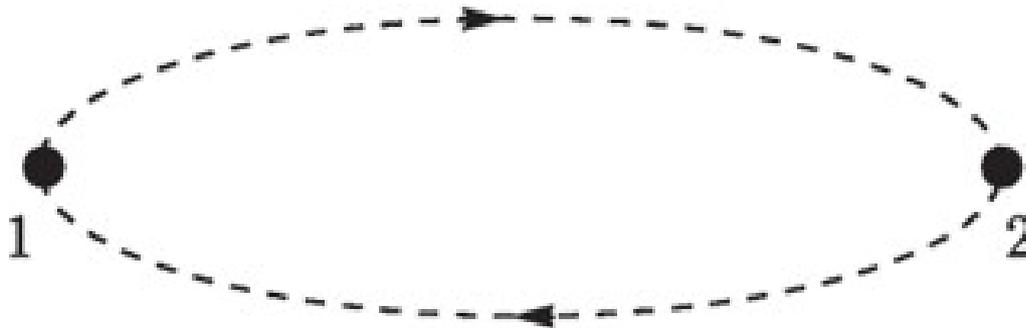
Атомы серебра нейтральны. При наличии классического магнитного момента у атомов они будут случайным образом втягиваться в неоднородное магнитное поле, так как магнитные моменты у атомов в пучке будут ориентированы случайным образом. На экране должна быть полоса. Вместо этого наблюдаются две разделённые области. Это доказывает как наличие магнитного момента, так и наличие только двух возможных значений его проекции

Эффект Зеемана.



В магнитном поле двум направлениям проекции магнитного момента электрона на направление магнитного поля соответствуют два разных значения энергии. При изменении направления проекции на противоположное поглощается или излучается фотон

Принцип тождественности частиц.



Принцип тождественности частиц: Перестановка двух одинаковых частиц не должна изменять состояние системы.

Утверждение должно быть справедливо как в классической, так и в квантовой механике.

В квантовой механике проследить частицу невозможно в общем случае (вероятностное описание). Поэтому нумеровать частицы не имеет смысла.

Перестановочная симметрия волновых многочастичных функций.

Требование принципа тождественности частиц

$$\|\psi(q_1, q_2)\|^2 = \|\psi(q_2, q_1)\|^2$$

Две возможности

$$\psi(q_1, q_2) = \psi(q_2, q_1) - s - \text{целое, бозоны}$$

$$\psi(q_1, q_2) = -\psi(q_2, q_1) - s - \text{полуцелое, фермионы}$$

q_i – совокупность величин описывающих состояние частицы i

Принцип Паули

Пусть фермионы не взаимодействуют. Чтобы удовлетворить требованию перестановочной симметрии волновую функцию можно записать в виде детерминанта Слэттера

$$\psi(q_1, q_2, q_3, \dots) = \begin{vmatrix} \psi_1(q_1) & \psi_1(q_2) & \psi_1(q_3) & \dots \\ \psi_2(q_1) & \psi_2(q_2) & \psi_2(q_3) & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_N(q_1) & \psi_N(q_2) & \psi_N(q_3) & \dots \end{vmatrix}$$

При совпадении индексов любых двух одночастичных функций многочастичная волновая функция обращается в ноль.



В одном состоянии не более одного электрона.

Функции распределения в классической и квантовой механике.

Классическая механика: многочастичная функция распределения равна вероятности обнаружить каждую из частиц с определёнными координатами и импульсами, одночастичная функция распределения — вероятность обнаружить частицу с определённой координатой и импульсом. Вероятностное описание обусловлено большим количеством частиц.

Квантовая механика: многочастичная равновесная функция распределения даёт вероятность обнаружить систему частиц в определённом стационарном состоянии. Аналогично равновесная одночастичная функция распределения даёт вероятность обнаружить частицу в стационарном состоянии (среднее число заполнения частицей стационарного состояния).

Для нахождения вероятности значения определённой величины (координаты, импульса, ...) в квантовой статистике используется матрица плотности (статистический оператор)

Распределение Гиббса.

Распределение Гиббса выводится для равновесного состояния системы (классической или квантовой).

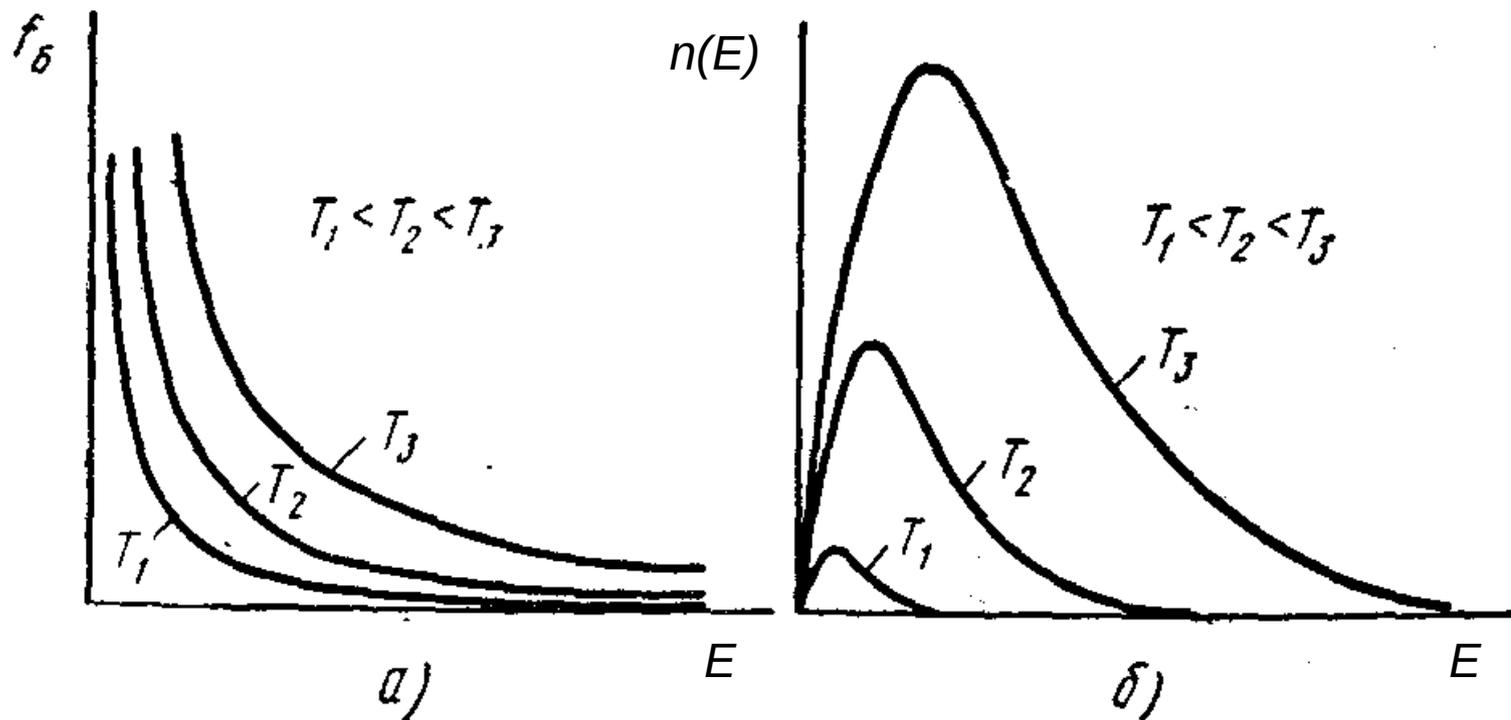
$$W_n = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{E_n}{k_B T}\right) \quad Z = \sum_n \exp\left(-\frac{E_n}{k_B T}\right)$$

Важно: E_n — энергия системы в состоянии n . Если система состоит из взаимодействующих частиц, то состояния отдельных частиц нестационарные и их энергия не сохраняется. Если система состоит из невзаимодействующих частиц (идеальный газ), то можно рассматривать одночастичную функцию распределения. Средние числа заполнения можно вводить в ряде случаев и для слабо взаимодействующих частиц

Распределение Бозе-Эйнштейна.

Функция Бозе-Эйнштейна — среднее число заполнения состояния частицы в системе невзаимодействующих бозонов в равновесном состоянии.

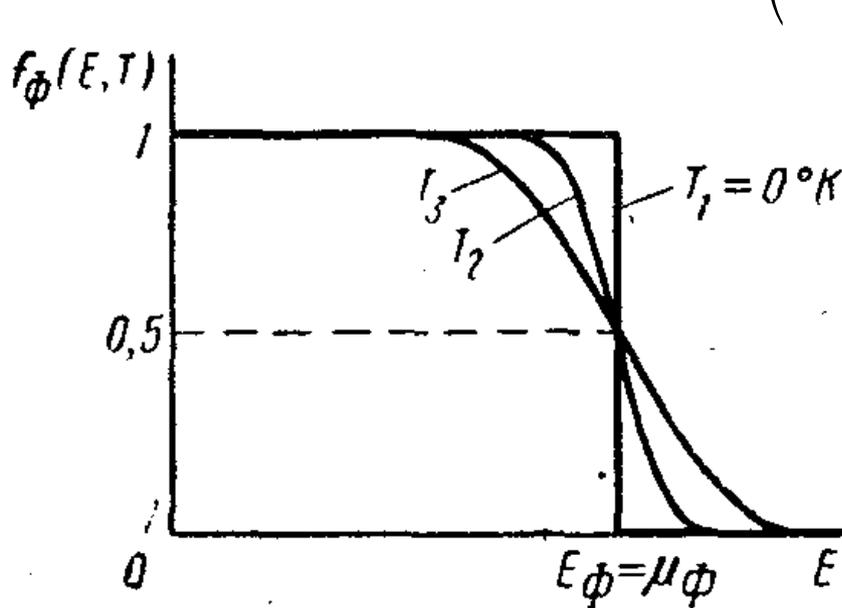
$$f_{\sigma} = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu}{k_B T}\right) - 1}$$



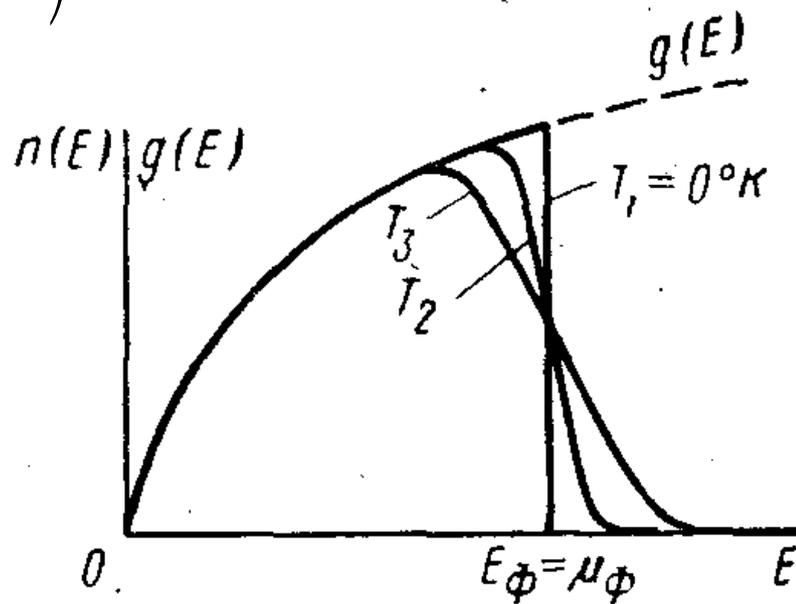
Распределение Ферми-Дирака.

Функция Ферми-Дирака — среднее число заполнения состояния частицы в системе невзаимодействующих фермионов в равновесном состоянии.

$$f_{\phi} = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu}{k_B T}\right) + 1}$$



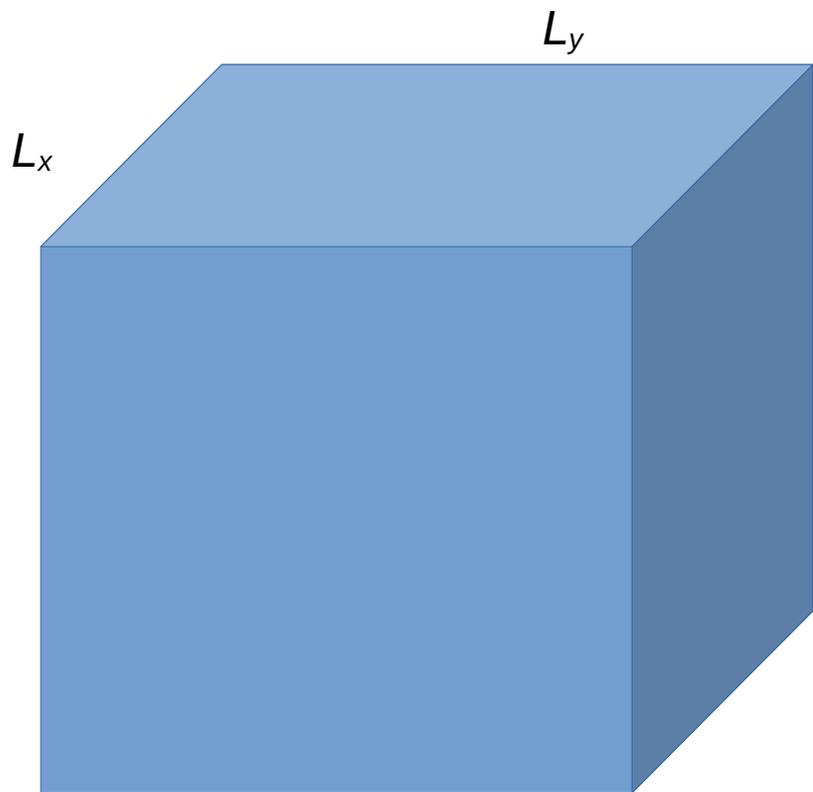
а)



б)

Концентрация свободных электронов. Условия Борна-Кармана

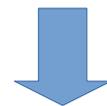
Условия Борна-Кармана



Объём состояния в пространстве импульсов

$$\psi(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp\left(i \frac{p_x x + p_y y + p_z z}{\hbar}\right)$$

$$\psi(x + L_x, y + L_y, z + L_z) = \psi(x, y, z)$$



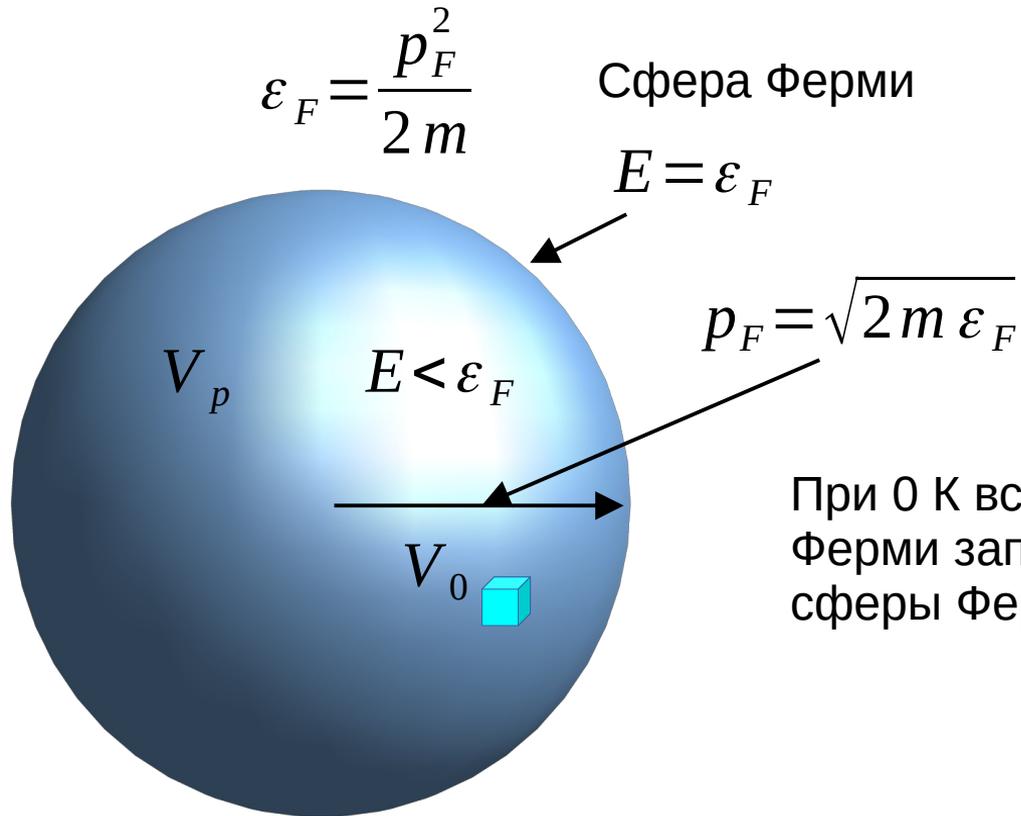
$$p_x = \frac{2\pi\hbar}{L_x} n_x, n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

$$p_y = \frac{2\pi\hbar}{L_y} n_y, n_y = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

$$p_z = \frac{2\pi\hbar}{L_z} n_z, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

$$V_0 = \frac{(2\pi\hbar)^3}{V}$$

Концентрация свободных электронов.



При 0 К все состояния внутри сферы Ферми заполнены электронами, а вне сферы Ферми не заполнены

$$n = \frac{1}{V} \frac{2V_p}{V_0}$$

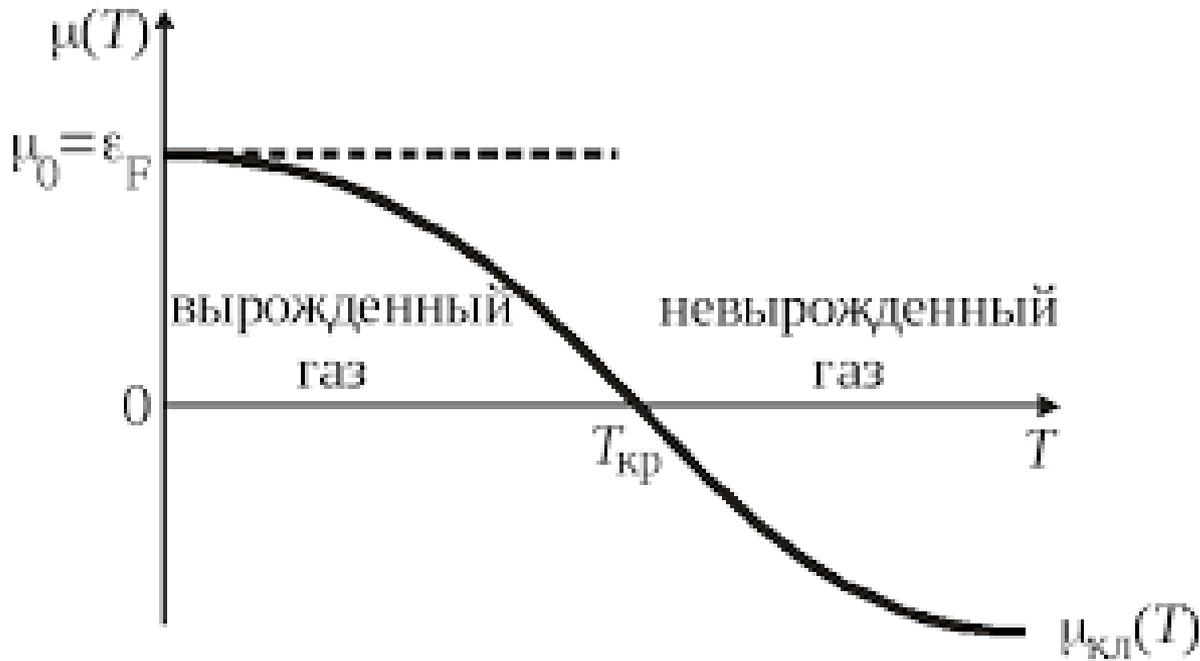
Концентрация свободных электронов при нулевой температуре.

$$n = \frac{1}{V} \frac{2V_p}{V_0}$$

Объём состояний, заполненных электронами в пространстве импульсов

$$V_p = \int \frac{d^3 p}{\exp\left(\frac{E - \mu}{k_B T}\right) + 1} = 4 \pi \int_0^\infty \frac{p^2 dp}{\exp\left(\frac{\frac{p^2}{2m} - \mu}{k_B T}\right) + 1} = 4 \sqrt{2} \pi m^{3/2} \int_0^\infty \frac{\sqrt{E} dE}{\exp\left(\frac{E - \mu}{k_B T}\right) + 1}$$

Энергия Ферми и химический потенциал.



$$n = n(\mu, T) = const$$

$$\mu = \mu(n, T)$$

При постоянной концентрации электронов химический потенциал электронов уменьшается при повышении температуры