

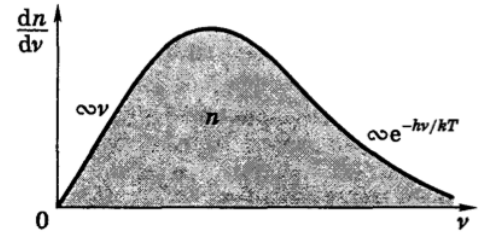
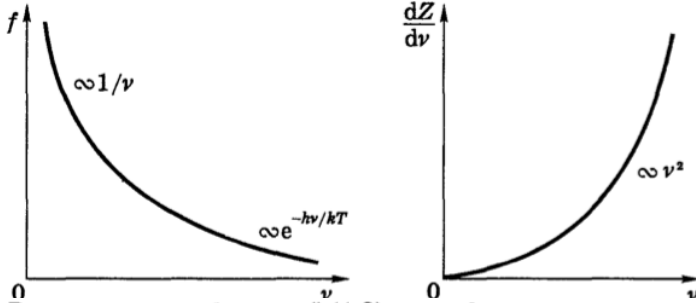
1 1) Равновесное электромагнитное излучение. Формула Планка. Закон Стефана-Больцмана. Закон смещения Вина. И2(112-117).

Эйнштейн сделал следующий шаг. Он предположил, и это подтвердилось экспериментом, что само излучение представляет собой *фотонный газ*, газ идеальный. У фотонов спин равен единице. Значит это бозоны, а они подчиняются статистике Бозе-Эйнштейна.

$$f = \frac{1}{e^{\epsilon/kT} - 1} \quad dZ = \frac{4\pi}{c^3} \nu^2 d\nu.$$

График распределения фотонов по частотам,

Графики функций f и $dZ/d\nu$ для фотонного газа



В соответствии с формулой (4.8) число фотонов с частотами в интервале $(\nu, \nu + d\nu)$ равно

$$dn = 2f dZ = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{d\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} \quad (4.23)$$

При переходе от ν и h к циклической частоте $\omega = 2\pi\nu$ и $\hbar = h/2\pi$ надо учесть, что $u_\nu d\nu = u_\omega d\omega$. Тогда формула Планка приобретает вид:

$$u_\omega = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}$$

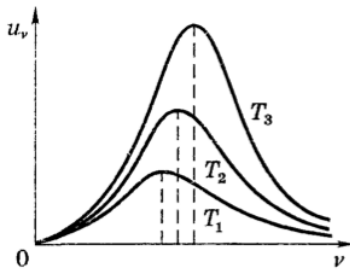


Рис. 4.12

$$u_\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

представим (4.24) в виде

$$u_\nu = \nu^3 F(\nu/T),$$

получила название *формулы Вина*.

Воспользовавшись (4.26), запишем:

$$u = \int_0^\infty u_\nu d\nu = \int_0^\infty \nu^3 F\left(\frac{\nu}{T}\right) d\nu = T^4 \int_0^\infty x^3 F(x) dx \quad (4.27)$$

где введена новая переменная $x = \nu/T$. Последний интеграл представляет собой некоторую постоянную a , и мы приходим

$$u = aT^4 \quad (4.28)$$

Закон Стефана-Больцмана. Вместо плотности энергии излучения u удобнее пользоваться понятием *энергетической светимости* M , которая выражает поток энергии излучения с единицы поверхности по всем направлениям в пределах телесного угла 2π . Можно показать, что обе эти величины связаны соотношением

$$M = \frac{c}{4} u \quad (4.29)$$

Остается учесть (4.28), и мы получим

$$M = \sigma T^4 \quad (4.30)$$

Эта формула и выражает *закон Стефана-Больцмана*. Здесь σ — *постоянная Стефана-Больцмана*. С помощью формулы

1.2 Квантование атома водорода. Квантовые числа. Кратность вырождения энергетических уровней. И1(133-139).

Рассмотрим простейшую систему, состоящую из электрона e , который движется в кулоновском поле ядра с зарядом Ze . Такую систему называют *водородоподобной*. При $Z = 1$ это атом

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

Уравнение Шредингера в этом случае имеет вид

$$(6.2) \quad \nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{r} \right) \psi = 0.$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (6.3)$$

Решение уравнения (6.2) проводят методом разделения переменных с учетом естественных требований, налагаемых на ψ -функцию: она должна быть однозначной, конечной, непрерывной и гладкой. В процессе решения обнаруживается, что этим требованиям можно удовлетворить при *любых* положительных значениях энергии E , но в области отрицательных значений E — только при *дискретных* значениях E , а именно, если

$$E_n = -\frac{me^2 Z^2}{2\hbar^2 n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Собственные функции уравнения (6.2), т. е. ψ -функции, содержат, как выяснилось, три целочисленных параметра — n , l , m :

$$\psi = \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi), \quad (6.5)$$

где n называют *главным квантовым числом* (это то же n , что и в выражении для E_n). Параметры же l и m — это *орбитальное* и *магнитное квантовые числа*, определяющие по формулам (5.25) и (5.26) модуль момента импульса M и его проекцию M_z .

В процессе решения выясняется, что решения, удовлетворяющие естественным условиям, получаются лишь при значениях l , не превышающих $n - 1$. Таким образом, при данном n квантовое число l может принимать n значений:

$$l = 0, 1, 2, \dots, n - 1.$$

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

Кратность вырождения. Состояния с одинаковой энергией называют *вырожденными*, а число различных состояний с определенным значением энергии E_n — *кратностью вырождения* данного энергетического уровня.

Кратность вырождения n -го уровня водородоподобной системы можно определить, учитывая число возможных значений l и m . Каждому из n значений квантового числа l соответствует $2l + 1$ значений m . Поэтому полное число N различных состояний для данного n равно

$$N = \sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = 1 + 3 + 5 + \dots + (2n - 1) = n^2.$$

Собственные функции уравнения (6.2) представляют собой произведение двух функций, одна из которых зависит только от r , а другая — только от углов θ и φ :

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (6.12)$$

где первый сомножитель зависит от квантовых чисел n и l , второй же — от l и m .

Квантовое число l	0	1	2	3	4	5
Символ состояния	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>	<i>g</i>	<i>h</i>

2. Фотозффект. Законы фотозффекта. Опыты Герца и Столетова. Формула Эйнштейна. Коротковолновая граница сплошного рентгеновского спектра. И1(12-21).

1. Фототок насыщения пропорционален падающему световому потоку (при одном и том же спектральном составе). Это значит, что число электронов, вырываемых светом ежесекундно, пропорционально мощности падающего света. Впервые это было установлено А.Г. Столетовым (1889).

2. Для каждого металла существует максимальная длина волны света λ_k (или минимальная частота ω_k), при которой еще происходит вырывание электронов. Если длина волны превышает λ_k — так называемую *красную границу фотозффекта*, — то испускание фотозэлектронов отсутствует даже при достаточно большой интенсивности падающего света*.

3. Максимальная кинетическая энергия K фотозэлектронов *линейно* зависит от частоты ω облучающего света (причем $K_{\text{макс}}$ растет с увеличением ω) и не зависит от интенсивности света. Заметим, что максимальное значение кинетической энергии фотозэлектронов определяют по так называемой *задерживающей разности потенциалов* (этот вопрос рассмотрен ниже).

Формула Эйнштейна. Полученная электроном энергия $\hbar\omega$ частично затрачивается на освобождение из металла. А оставшая часть переходит в кинетическую энергию вылетевшего из металла фотозэлектрона. Минимальную энергию, необходимую для освобождения электрона из металла, т. е. для преодоления потенциального барьера, называют *работой выхода A* . Следовательно, для фотозэлектронов с максимальной кинетической энергией $K_{\text{макс}}$ закон сохранения энергии в элементарном акте поглощения фотона можно записать так:

$$\hbar\omega = A + K_{\text{макс}} \quad (1.3)$$

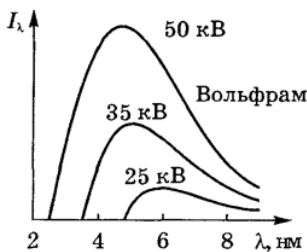


Рис. 1.7

спектр видимого белого света. На рис. 1.7 показаны экспериментальные кривые распределения интенсивности I_λ (т. е. $dI/d\lambda$) по длинам волн λ , полученные для разных значений ускоряющего напряжения V (они указаны на рисунке).

И здесь мы обнаруживаем наличие *коротковолновой границы* сплошного рентгеновского спектра.

В целом процесс излучения при торможении электрона в металле антикатода весьма сложен, но существование коротковолновой границы с корпускулярной точки зрения имеет очень простое объяснение. Действительно, если излучение возникает за счет энергии, теряемой электроном при торможении, то величина кванта $\hbar\omega$ не может быть больше энергии электрона eV . Отсюда следует, что частота ω излучения не может превышать значения $\omega_{\text{макс}} = eV/\hbar$. Значит, длина волны излучения не может быть меньше, чем

$$\lambda_{\text{мин}} = \frac{2\pi\hbar c}{eV} = \frac{1,24}{V},$$

где V , кВ, а $\lambda_{\text{мин}}$, нм.

эффектом, или *фотозффектом* называют испускание электронов веществом под действием света. Исследования

2.2 Орбитальный механический и магнитный моменты электрона. Магнетон Бора. Опыт Штерна и Герлаха. Спин электрона. Собственный магнитный момент электрона. И1(51-52, 143-146, 169-173).

Магнитный момент атома водорода. Пусть электрон движется со скоростью v по орбите радиусом r (рис. 2.8). Через площадку, пересекающую орбиту электрона, переносится ежесекундно заряд ev , где e — заряд электрона, v — число оборотов электрона вокруг ядра в секунду. Следовательно, движущийся по орбите электрон образует круговой ток $I = ev$. Поскольку заряд электрона отрицателен, направление движения электрона противоположно направлению тока.

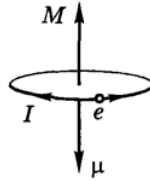


Рис. 2.8

Магнитный момент такого тока (в гауссовой системе) по определению равен $\mu = IS/c$, или $\mu = ev \cdot \pi r^2/c$. Учитывая, что $2\pi r v = v$, перепишем предыдущее выражение в виде

$$\mu = \frac{erv}{2c}.$$

Остается учесть, что момент импульса электрона $M = r m v$, и мы получим:

$$\mu = -\frac{e}{2mc} M,$$

Вектор M называют *орбитальным моментом* электрона. Он образует с направлением движения электрона правовинтовую систему (см. рис. 2.8).

Воспользовавшись боровским правилом квантования момента импульса, т. е. формулой (2.18), перепишем (2.33) в виде

$$\mu = \mu_B n, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (2.35)$$

$$M = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots,$$

где μ_B — это так называемый *магнетон Бора*:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} = 0,927 \cdot 10^{-20} \text{ эрг/Гс}. \quad (2.36)$$

Спин — существенно квантовая величина, не имеющая классического аналога. Он ничего общего не имеет с представлением о вращающейся частице, как первоначально предполагали (отсюда и название).

Спин характеризует внутреннее свойство электрона подобно массе и заряду. Выяснилось, что спин является свойством одновременно квантовым и релятивистским*. В отличие от орбитального момента, спин всегда сохраняется (как внутреннее свойство).

Спин электрона определяется по общим законам квантовой теории. Аналогично орбитальному моменту, определенные значения в одном и том же состоянии могут иметь квадрат спина M_s^2 (а значит и модуль спина M_s), и одна из его проекций M_{sz} на произвольно выбранную ось Z :

$$M_s = \hbar\sqrt{s(s+1)}, \quad s = 1/2, \quad (6.24)$$

где s — *спиновое квантовое число*, и

$$M_{sz} = \hbar m_s, \quad m_s = \pm s = +1/2 \text{ и } -1/2. \quad (6.25)$$

Значение $s = 1/2$ получено из следующих соображений. Аналогично орбитальному моменту число возможных значений проекции m_s , соответствующих данному значению s , равно $2s + 1$. Экспериментально было установлено, что это число для электрона равно двум, т. е. $2s + 1 = 2$, откуда $s = 1/2$.

Полный момент импульса электрона. С механическими моментами (орбитальным и спиновым) связаны магнитные моменты. В результате их взаимодействия происходит сложение моментов — возникает *полный момент импульса электрона*. Символически это записывают так: $M_j = M_l + M_s$, где j — *квантовое число полного момента*.

$$M_j = \hbar\sqrt{j(j+1)}, \quad j = l + s = l \pm 1/2.$$

3.1 Атом водорода по Бору. Постулаты Бора. Правило квантования Бора. Принцип соответствия. Экспериментальное доказательство дискретной структуры атомных уровней. Опыты Франка и Герца. И1(44-51).

1. Атом может длительное время* находиться только в определенных, так называемых *стационарных состояниях*, которые характеризуются дискретными значениями энергии E_1, E_2, E_3, \dots . В этих состояниях, вопреки классической электродинамике, атом не излучает.

2. При переходе атома из стационарного состояния с большей энергией E_2 в стационарное состояние с меньшей энергией E_1 происходит излучение кванта света (фотона) с энергией $\hbar\omega$:

$$\hbar\omega = E_2 - E_1. \quad (2.17)$$

Такое же соотношение выполняется и в случае поглощения, когда падающий фотон переводит атом с низшего энергетического уровня E_1 на более высокий E_2 , а сам исчезает.

Соотношение (2.17) называют *правилом частот Бора*. Заметим, что переходы атома на более высокие энергетические уровни могут быть обусловлены и столкновением с другими атомами.

Опыты Франка и Герца (1913). Эти опыты дали прямое доказательство дискретности атомных состояний. Идея опытов заключается в следующем. При неупругих столкновениях электрона с атомом происходит передача энергии от электрона атому. Если внутренняя энергия атома изменяется непрерывно, то атому может быть передана любая порция энергии. Если же состояния атома дискретны, то его внутренняя энергия при столкновении с электроном должна изменяться также дискретно — на значения, равные разности внутренней энергии атома в стационарных состояниях.

Следовательно, при неупругом столкновении электрон может передать атому лишь определенные порции энергии. Изменяя их, можно определить значения внутренних энергий стационарных состояний атома.

Это и предстояло проверить экспериментально с помощью установки, схема которой показана на рис. 2.5. В баллоне с парами ртути под давлением порядка 1 мм рт.ст. (≈ 130 Па) имелись три электрода: K — катод, C — сетка и A — анод. Электроны, испускаемые горячим катодом вследствие термоэлектронной эмиссии, ускорялись разностью потенциалов V между катодом и сеткой. Величину V можно было плавно менять. Между сеткой и анодом создавалось слабое тормозящее поле с разностью потенциалов около 0,5 В.

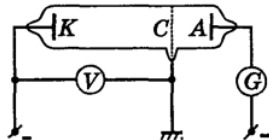


Рис. 2.5

Таким образом, если какой-то электрон проходит сквозь сетку с энергией, меньшей 0,5 эВ, то он не долетит до анода. Только те электроны, энергия которых при прохождении сетки больше 0,5 эВ, попадут на анод, образуя анодный ток I , доступный измерению.

В опытах (см. рис. 2.5) исследовалась зависимость анодного тока I (гальванометром G) от ускоряющего напряжения V (вольтметром V). Полученные результаты представлены на рис. 2.6. Максимумы соответствуют значениям энергии $E_1 = 4,9$ эВ, $E_2 = 2E_1$, $E_3 = 3E_1$ и т. д.*

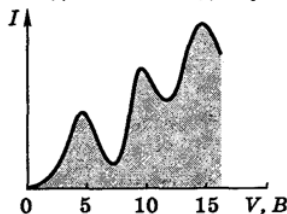


Рис. 2.6

Такой вид кривой объясняется тем, что атомы действительно могут поглощать лишь дискретные порции энергии, равные 4,9 эВ.

3.2 Матричная формулировка квантовой механики. Векторное пространство физических состояний. Обозначения Дирака. Координатное и импульсное представления. Ф8(129-135).

$$| = \sum_i |i\rangle \langle i|. = \langle \chi | \varphi \rangle = \sum_{\text{все } i} \langle \chi | i \rangle \langle i | \varphi \rangle. \quad \text{<-обозначение Дирака (что-то вроде скалярного произв.)}$$

ривать следующим образом. Любой вектор состояния $|\varphi\rangle$ может быть представлен в виде линейной комбинации совокупности базисных «векторов» с подходящими коэффициентами, или, если угодно, в виде суперпозиции «единичных векторов» в подходящих пропорциях. Чтобы подчеркнуть, что коэффициенты $\langle i | \varphi \rangle$ — это просто обычные (комплексные) числа, напомним

$$\langle i | \varphi \rangle = C_i.$$

Такое же уравнение можно написать и для всякого другого вектора состояния, скажем для $|\chi\rangle$, но, конечно, с другими коэффициентами, скажем с D_i . Тогда будем иметь

$$|\chi\rangle = \sum_i |i\rangle D_i, \quad (6.11)$$

где D_i — это просто амплитуды $\langle i | \chi \rangle$.

Представим, что мы начали бы с того, что в (6.1) абстрагивались бы от φ . Тогда мы бы имели

$$\langle \chi | = \sum_i \langle \chi | i \rangle \langle i |. \quad (6.12)$$

Вспоминая, что $\langle \chi | i \rangle = \langle i | \chi \rangle^*$, можно записать это в виде

$$\langle \chi | = \sum_i D_i^* \langle i |. \quad (6.13)$$

А теперь интересно вот что: чтобы обратно получить $\langle \chi | \varphi \rangle$, можно просто *перемножить* (6.13) и (6.10). Только, делая это, надо быть внимательным к индексам суммирования, потому что они в разных уравнениях разные. Перепишем

$$\langle \chi | = \sum_j D_j^* \langle j |.$$

Это ничего не меняет. Объединяя с (6.10), получаем

$$\langle \chi | \varphi \rangle = \sum_{ij} D_j^* \langle j | i \rangle C_i. \quad (6.14)$$

Вспомните, однако, что $\langle j | i \rangle = \delta_{ij}$, так что в сумме останутся только члены с $j = i$. Выйдет

$$\langle \chi | \varphi \rangle = \sum_i D_i^* C_i, \quad (6.15)$$

где, как вы помните, $D_i^* = \langle i | \chi \rangle^* = \langle \chi | i \rangle$, а $C_i = \langle i | \varphi \rangle$. Опять мы являемся свидетелями тесной аналогии со скалярным произведением

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = \sum_i A_i B_i.$$

Единственная разница — что D_i нужно комплексно сопрягать. Значит, (6.15) утверждает, что если разложить векторы состояний $\langle \chi |$ и $|\varphi\rangle$ по базисным векторам $\langle i |$ или $|i\rangle$, то амплитуда перехода из φ в χ дается своего рода скалярным произведением (6.15). А это просто (6.1), записанное в других символах. Мы ходим по кругу, привыкая к новым символам.

Тогда (6.8) совпадает с

$$|\varphi\rangle = \sum_i |i\rangle C_i.$$

$$\langle \chi | A | \varphi \rangle = \sum_{ij} \langle \chi | i \rangle \langle i | A | j \rangle \langle j | \varphi \rangle.$$

$$\langle \chi | B A | \varphi \rangle = \sum_{ijk} \langle \chi | i \rangle \langle i | B | j \rangle \langle j | A | k \rangle \langle k | \varphi \rangle.$$

4.1 Волновые свойства частиц. Волны де-Бройля. Опыты Девиссона - Джермера и Томсона. Фазовая и групповая скорость волн де-Бройля. Волновой пакет. Соотношения неопределенности Гейзенберга. И1(60-75).

Луи де-Бройль (1923) высказал и развил идею о том, что материальные частицы должны обладать и волновыми свойствами. К тому времени уже сложилась парадоксальная, но под-
относящаяся к фотонам, имеет универсальный характер. Т. е. для всех частиц длина волны
Эта формула получила название *формулы де-Бройля*, а λ — *дебройлевской длины волны* частицы с импульсом p .

С частотой ω и волновым числом k связаны две скорости — фазовая v_ϕ и групповая u :

чая. Полагая $E = p^2/2m$ (кинетическая энергия), перепишем соотношения (3.3) с помощью (3.4) в иной форме:

Отсюда видно, что групповая скорость равна скорости частицы, т. е. является принципиально наблюдаемой величиной, в отличие от v_ϕ — из-за неоднозначности E .

Из первой формулы (3.5) следует, что фазовая скорость дебройлевских волн

т. е. зависит от частоты ω , а значит дебройлевские волны обладают *дисперсией* даже в вакууме. Далее будет показано, что

Опыты Дэвиссона и Джермера (1927). Идея их опытов заключалась в следующем. Если пучок электронов обладает волновыми свойствами, то можно ожидать, даже не зная механизма отражения этих волн, что их отражение от кристалла будет иметь такой же интерференционный характер, как у рентгеновских лучей.

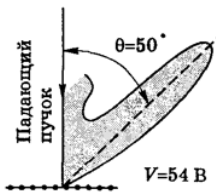


Рис. 3.2

Детектор перемещали в плоскости падения, меняя угол θ . При угле $\theta = 50^\circ$ и ускоряющем напряжении $V = 54$ В наблюдался особенно отчётливый максимум отраженных электронов, полярная диаграмма которого показана на рис. 3.2.

Этот максимум можно истолковать как интерференционный максимум первого порядка от плоской дифракционной решетки с указанным выше периодом в соответствии с формулой

$$d \sin \theta = \lambda, \quad (3.9)$$

Полученные Дэвиссоном и Джермером результаты весьма убедительно подтверждают гипотезу де-Бройля. Заметим так-

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar.$$

ждает, что если положение частицы, например, по оси X известно с неопределенностью Δx , то в тот же момент проекцию импульса частицы на эту же ось можно измерить только с неопределенностью $\Delta p_x \approx \hbar/\Delta x$. Заметим, что эти ограничения не

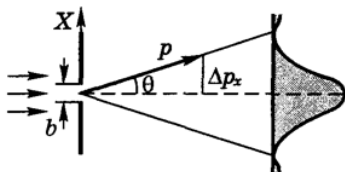


Рис. 3.9

(рис. 3.9). До прохождения частицы через щель ее проекция импульса p_x имеет точное значение: $p_x = 0$. Это значит, что $\Delta p_x = 0$, но координата x частицы является совершенно неопределенной согласно (3.20).

В результате дифракции возникает неопределенность значения p_x — проекции импульса, разброс которого

Учитывая, что $b \approx \Delta x$ и $p = 2\pi\hbar/\lambda$, получим из двух предыдущих выражений:

$$n = v_B/v_C,$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{p}.$$

$$n = \frac{k_C}{k_B} = \frac{\lambda_B}{\lambda_C}.$$

$$v_\phi = \frac{\omega}{k} \quad \text{и} \quad u = \frac{\partial \omega}{\partial k}.$$

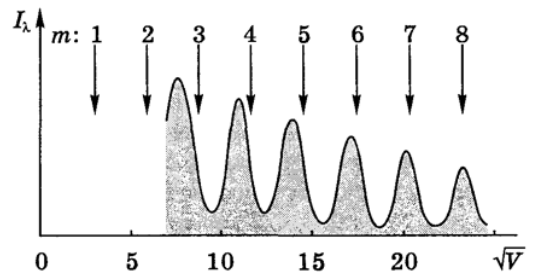
$$\hbar\omega = E \quad \text{и} \quad \hbar k = 2\pi\hbar/\lambda = p,$$

$$v_\phi = \frac{E}{p}, \quad u = \frac{\partial}{\partial p} \left(\frac{p^2}{2m} \right) = \frac{p}{m} = v.$$

$$v_\phi = \frac{E}{\sqrt{2mE}} = \sqrt{\frac{E}{2m}} = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2m}},$$

$$2d \sin \alpha = m\lambda, \quad m = 1, 2, 3, \dots,$$

$$\sqrt{V_m} \propto m,$$



$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar.$$

Согласно второму соотношению (3.21) для измерения энергии с погрешностью ΔE необходимо время, не меньшее, чем $\Delta t \approx \hbar/\Delta E$. Примером может служить «размытие» энергетиче-

$$b \sin \theta = \lambda.$$

$$\Delta p_x \approx p \sin \theta.$$

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \approx p\lambda = 2\pi\hbar,$$

4.2 Тожественность микрочастиц. Бозоны и фермионы. Принцип запрета Паули. Системы ферми- и бозе- частиц. Обменное взаимодействие. И2(99-102), Матв.(270-273).

- 1) частицы с *полуцелым спином*, их называют *фермионами*; они подчиняются *статистике Ферми-Дирака*;
- 2) частицы с *целым спином* — бозоны; они подчиняются *статистике Бозе-Эйнштейна*.

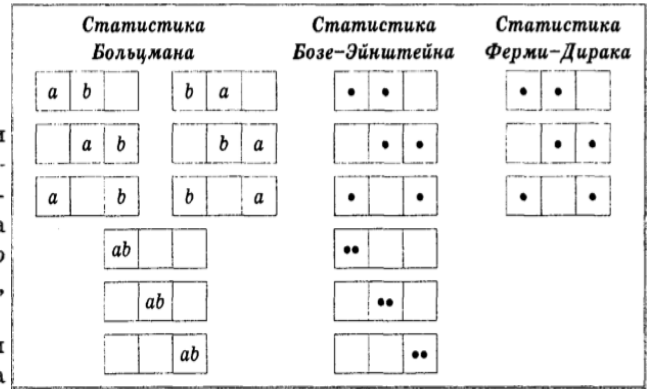
Во всех трех статистиках (классической, Бозе-Эйнштейна и Ферми-Дирака) допустимые микросостояния считаются *равновероятными*. Но различие их — в способах определения микросостояний и статистических весов. В статистике Больцмана считается, что даже тождественные частицы *принципиально различимы*. В квантовых же статистиках, наоборот, считается, что тождественные частицы *принципиально неразличимы*.

В статистике Ферми-Дирака в каждом квантовом состоянии может находиться не более одной частицы (*принцип Паули*), а в статистике Бозе-Эйнштейна — любое число частиц.

Квантовые распределения. Эти распределения представляют собой функции $f(\epsilon_i)$, определяющие средние числа частиц в одной фазовой ячейке с энергией ϵ_i , или функции заполнения ячеек:

1. Для фермионов функция $f(\epsilon_i)$ не может быть больше единицы, а для бозонов ее значение может быть любым ($f \geq 0$).
2. Если $f \ll 1$, то в знаменателях обоих распределений можно пренебречь единицей, и формула переходят в

$$f(\epsilon_i) = e^{(\mu - \epsilon_i)/kT} = Ae^{-\epsilon_i/kT},$$



для фермионов

$$f(\epsilon_i) = \frac{1}{e^{(\epsilon_i - \mu)/kT} + 1}$$

для бозонов

$$f(\epsilon_i) = \frac{1}{e^{(\epsilon_i - \mu)/kT} - 1}$$

3. В макросистеме уровни энергии ϵ_i частиц *квазинепрерывны* (расположены очень плотно). Поэтому индекс i у ϵ_i можно опустить.

4. Для бозонов значения μ в (4.3) не могут быть положительными, иначе при $\epsilon_i < \mu$ окажется, что $f < 0$, а это лишено физического смысла. Таким образом, для бозонов $\mu \leq 0$. У макросистем с переменным числом бозонов (к числу которых относятся, например, фотоны) $\mu = 0$, и формула (4.3) переходит в

$$(4.4) \quad f(\epsilon_i) = \frac{1}{e^{\epsilon_i/kT} - 1}$$

Обменное взаимодействие — взаимодействие тождественных частиц в [квантовой механике](#), приводящее к зависимости значения энергии системы частиц от её полного [спина](#). Представляет собой чисто квантовый эффект, исчезающий при предельном переходе к [классической механике](#).

Фазовые ячейки. Основная задача квантовых статистик — это нахождение соответствующих им функций распределения частиц по тем или иным параметрам (например, по энергиям), а также определение средних значений этих параметров, характеризующих наиболее вероятное макросостояние всей системы частиц.

Для описания состояния системы частиц рассматривают воображаемое шестимерное пространство, каждая точка которого

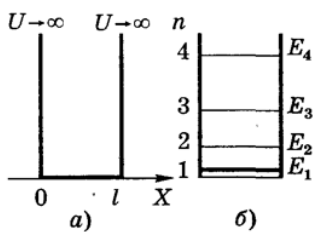
характеризуется шестью координатами: x, y, z, p_x, p_y, p_z . Это так называемое *фазовое пространство*. Состояние системы определяется тем, как распределены в этом пространстве точки, изображающие состояния всех N частиц системы. При этом нужно учесть присущий частицам корпускулярно-волновой дуализм, согласно которому неопределенности координаты x и соответствующей проекции импульса p_x могут быть определены только с неопределенностью δx и δp_x , произведение которых, согласно *принципу неопределенностей Гейзенберга*, $\delta x \cdot \delta p_x \geq \hbar$ (здесь $\hbar = 2\pi\hbar$). Аналогично и для других пар: y и p_y, z и p_z .

Поэтому естественно считать, что данному состоянию частицы в фазовом пространстве соответствует не точка, а *фазовая ячейка*, объем которой

$$\delta\Lambda = \delta x \cdot \delta y \cdot \delta z \cdot \delta p_x \cdot \delta p_y \cdot \delta p_z \approx \hbar^3. \quad (4.1)$$

Распределение частиц по таким фазовым ячейкам есть *предельно подробное квантовое описание* состояния системы. Нас будет интересовать наиболее вероятное распределение частиц по фазовым ячейкам. Решение этой задачи достаточно сложно, и его нет смысла здесь приводить. Мы приведем лишь окончательные результаты — распределения частиц по энергиям ϵ_i .

5.1 Частица в бесконечной прямоугольной потенциальной яме. Стационарные и нестационарные состояния. И1(87-93), БКЗ(488-489).



Случай 1. Он является самым простым: ширина ямы равна l , стенки ямы бесконечно высокие (рис. 4.1, а). Потенциальная энергия в этом случае имеет следующие значения: она равна нулю в интервале $(0, l)$ и обращается в бесконечность при $x = 0$ и $x = l$.

$\psi(0) = a \sin \alpha = 0$
 следует, что $\alpha = 0$. Из условия же
 $\psi(l) = a \sin kl = 0$
 в свою очередь следует, что
 $kl = \pm \pi n,$

Исходим из уравнения Шредингера (4.9). Для одномерного случая в пределах ямы (где $U = 0$) это уравнение упрощается:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k^2 \psi = 0, \quad (4.10)$$

где введено обозначение

$$k^2 = 2mE/\hbar^2. \quad (4.11)$$

Общее решение уравнения (4.10) имеет вид

$$\psi(x) = a \sin(kx + \alpha), \quad (4.12)$$

где a и α — произвольные постоянные.

Стационарные состояния. Особую роль в квантовой теории играют стационарные состояния — состояния, в которых все наблюдаемые физические величины не меняются с течением времени. Сама Ψ -функция, как уже говорилось, принципиально ненаблюдаема. В стационарных состояниях она имеет вид

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-i\omega t}, \quad \omega = E/\hbar, \quad (4.6)$$

где функция $\psi(\mathbf{r})$ не зависит от времени, а выражение для частоты ω написано согласно (3.2).

При таком виде Ψ -функции плотность вероятности P остается постоянной. В самом деле,

$$P = \Psi\Psi^* = \psi(\mathbf{r}) \cdot \psi^*(\mathbf{r}), \quad (4.7)$$

т. е. действительно, плотность вероятности P от времени не зависит.

Для нахождения функции $\psi(\mathbf{r})$ в стационарных состояниях подставим выражение (4.6) в уравнение (4.5), и мы получим

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi = E\psi. \quad (4.8)$$

Это уравнение называют *уравнением Шредингера для стационарных состояний*. В отличие от него, (4.5) называют *временным* или *общим уравнением Шредингера*.

В дальнейшем мы будем иметь дело только с уравнением (4.8) и будем записывать его (как это обычно принято) в виде

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U)\psi = 0. \quad (4.9)$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\psi(x) = a \sin(n\pi x/l).$$

$$a^2 \int_0^l \sin^2 \frac{n\pi x}{l} dx = 1. \quad a^2(1/2)l = 1,$$

$$\psi_n(x) = \sqrt{2/l} \sin(n\pi x/l), \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

5.2 Орбитальный механический и магнитный моменты электрона. Магнетон Бора. Опыт Штерна и Герлаха. Спин электрона. Собственный магнитный момент электрона. И1(51-52, 143-146, 169-173).

Магнитный момент атома водорода. Пусть электрон движется со скоростью v по орбите радиусом r (рис. 2.8). Через площадку, пересекающую орбиту электрона, переносится ежесекундно заряд ev , где e — заряд электрона, v — число оборотов электрона вокруг ядра в секунду. Следовательно, движущийся по орбите электрон образует круговой ток $I = ev$. Поскольку заряд электрона отрицателен, направление движения электрона противоположно направлению тока.

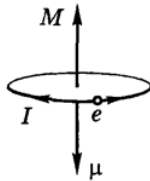


Рис. 2.8

Магнитный момент такого тока (в гауссовой системе) по определению равен $\mu = IS/c$, или $\mu = ev \cdot \pi r^2/c$. Учитывая, что $2\pi r v = v$, перепишем предыдущее выражение в виде

$$\mu = \frac{evv}{2c}.$$

Остается учесть, что момент импульса электрона $M = r m v$, и мы получим:

$$\mu = -\frac{e}{2mc} M,$$

Вектор M называют *орбитальным моментом* электрона. Он образует с направлением движения электрона правовинтовую систему (см. рис. 2.8).

Воспользовавшись боровским правилом квантования момента импульса, т. е. формулой (2.18), перепишем (2.33) в виде

$$\mu = \mu_B n, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (2.35)$$

$$M = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots,$$

где μ_B — это так называемый *магнетон Бора*:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} = 0,927 \cdot 10^{-20} \text{ эрг/Гс}. \quad (2.36)$$

Спин — существенно квантовая величина, не имеющая классического аналога. Он ничего общего не имеет с представлением о вращающейся частице, как первоначально предполагали (отсюда и название).

Спин характеризует внутреннее свойство электрона подобно массе и заряду. Выяснилось, что спин является свойством одновременно квантовым и релятивистским*. В отличие от орбитального момента, спин всегда сохраняется (как внутреннее свойство).

Спин электрона определяется по общим законам квантовой теории. Аналогично орбитальному моменту, определенные значения в одном и том же состоянии могут иметь квадрат спина M_s^2 (а значит и модуль спина M_s), и одна из его проекций M_{sz} на произвольно выбранную ось Z :

$$M_s = \hbar\sqrt{s(s+1)}, \quad s = 1/2, \quad (6.24)$$

где s — *спиновое квантовое число*, и

$$M_{sz} = \hbar m_s, \quad m_s = \pm s = +1/2 \text{ и } -1/2. \quad (6.25)$$

Значение $s = 1/2$ получено из следующих соображений. Аналогично орбитальному моменту число возможных значений проекции m_s , соответствующих данному значению s , равно $2s + 1$. Экспериментально было установлено, что это число для электрона равно двум, т. е. $2s + 1 = 2$, откуда $s = 1/2$.

Полный момент импульса электрона. С механическими моментами (орбитальным и спиновым) связаны магнитные моменты. В результате их взаимодействия происходит сложение моментов — возникает *полный момент импульса электрона*. Символически это записывают так: $M_j = M_l + M_s$, где j — *квантовое число полного момента*.

$$M_j = \hbar\sqrt{j(j+1)}, \quad j = l + s = l \pm 1/2.$$

6.1 Квантовые свойства электромагнитного излучения. Фотоны. Энергия и импульс фотона. Регистрация одиночных фотонов. Опыт Боте. Средняя плотность энергии и интенсивность электромагнитного излучения в рамках волновой и корпускулярной теории. Давление света. И1(21- 24), М(14-17).

Эйнштейна о световых квантах. В этом опыте тонкую металлическую фольгу F устанавливали между двумя быстродействующими счетчиками G_1 и G_2 (рис. 1.9). Фольгу облучали слабым пучком рентгеновского излучения X , под действием которого она сама становилась источником рентгеновского излучения. Вследствие весьма слабой интенсивности первичного пучка количество квантов, испускаемых фольгой, было достаточно мало.

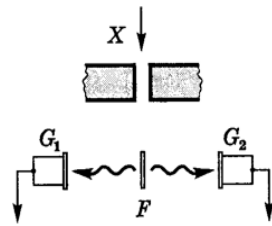


Рис. 1.9

Если бы энергия этого излучения распространялась в виде сферических волн, то оба счетчика должны были бы срабатывать одновременно. Опыт, однако, показал, что счетчики реагировали совершенно независимо друг от друга, и число совпадений не превышало ожидаемого числа случайных совпадений. Все происходило так, как если бы излучение фольги F распространялось в виде отдельных квантов, которые могли попадать либо в один, либо в другой счетчик.

Это можно объяснить лишь тем, что в отдельных актах испускания возникают кванты излучения, т.е. частицы, летящие то в одном, то в другом направлении. Конечно, была принята убедительностью подтвердили гипотезу Эйнштейна о световых квантах — фотонах.

Свет частоты ω по Эйнштейну — это по существу поток фотонов с энергией $\varepsilon = \hbar\omega$. Свет распространяется в вакууме со скоростью c . Значит с такой же скоростью распространяются и фотоны. Согласно теории относительности полная энергия E любой частицы, движущейся со скоростью v , определяется как

$$E = mc^2 / \sqrt{1 - (v/c)^2}. \quad (1.10)$$

В случае фотона $v = c$, и знаменатель этого выражения обращается в нуль. Для фотона, имеющего конечную энергию, это возможно лишь при условии $m = 0$.

Таким образом, мы имеем дело с частицей, масса покоя которой равна нулю.

Воспользовавшись связью между энергией E и импульсом p движущейся частицы, т. е.

$$E^2 - p^2c^2 = m^2c^4, \quad (1.11)$$

приходим к выводу, что фотон ($m = 0$) обладает не только энергией $E = \hbar\omega$, но и импульсом

$$p = \hbar\omega/c. \quad \boxed{\varepsilon = \hbar\omega, \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}, \quad 12}$$

Отношение $\omega/c = 2\pi\nu/c = 2\pi/\lambda = k$, где k — волновое число, и тогда (1.12) примет вид $p = \hbar k$.

Амплитуда волны \mathcal{E}_0 связана с плотностью энергии электромагнитного поля ϖ :

$$\varpi = \varepsilon\varepsilon_0\mathcal{E}^2, \quad (1.8)$$

а интенсивность волны — с ее средним значением $\langle \varpi \rangle = \frac{1}{2} \varepsilon\varepsilon_0\mathcal{E}_0^2$:

$$I = \langle \varpi \rangle \cdot c = \frac{1}{2} \varepsilon\varepsilon_0\mathcal{E}_0^2 \cdot c. \quad (1.9)$$

В корпускулярной теории поток энергии, проходящей за время dt через сечение площадью Σ , равен энергии фотонов, заключенных в объеме $\Sigma \cdot cdt$. Чтобы вычислить эту энергию, приходится ввести еще одну характеристику — концентрацию фотонов n_ϕ

(число фотонов, приходящихся на единицу объема $V = 1\text{ м}^3$ электромагнитного поля). Тогда энергия фотонов в объеме $(cdt\Sigma)$

$$E_\phi = n_\phi \cdot \hbar\omega \cdot (cdt\Sigma), \quad (1.10)$$

а плотность энергии

$$\varpi = n_\phi \hbar\omega, \quad (1.11)$$

и интенсивность волны (средняя плотность потока энергии)

$$I = \frac{E_\phi}{\Sigma dt} = n_\phi \hbar\omega \cdot c. \quad (1.12)$$

Сравнивая (1.8) и (1.11), видим, что плотность энергии с одной стороны (волновой), пропорциональна квадрату амплитуды, а с другой стороны (корпускулярной) — концентрации фотонов:

$$\langle \varpi \rangle = \frac{1}{2} \varepsilon\varepsilon_0\mathcal{E}_0^2 = n_\phi \hbar\omega. \quad (1.13)$$

Свет	
Волновая теория	Корпускулярная теория
$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 \cos(\omega t - kx)$	$E_\phi = \hbar\omega$
$B = B_0 \cos(\omega t - kx)$	$p_\phi = \hbar k$
$\mathcal{E} = cB, [\mathbf{E}/\mathcal{E}, \mathbf{B}/B] = \mathbf{k}/k$	
Закон дисперсии	
$\omega = ck$	$E_\phi = cp$
Средняя плотность энергии	
$\langle \varpi \rangle = \frac{\varepsilon\varepsilon_0}{2} \mathcal{E}_0^2$	$\langle \varpi \rangle = n_\phi \hbar\omega$
Интенсивность (средняя плотность потока энергии) $I = c\langle \varpi \rangle$	
$I = c \frac{\varepsilon\varepsilon_0}{2} \mathcal{E}_0^2$	$I = cn_\phi \hbar\omega$
Средняя плотность потока импульса	
I/c	$cn_\phi \hbar k$

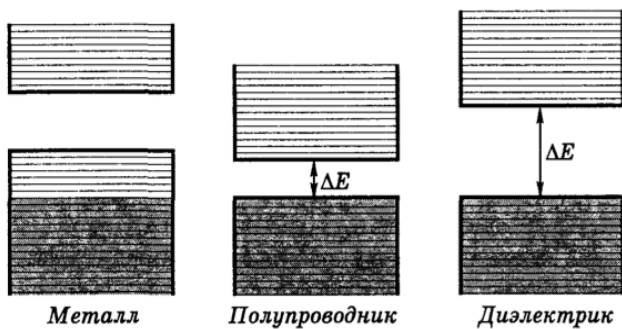
6.2 Электроны в периодическом потенциале кристаллической решетки. Энергетические зоны электронов в кристаллах. Эффективная масса электрона. Проводники, полупроводники и диэлектрики. И2(108-112), ГН(273-281, 284-288) или Матв.(335-344, 352-353).

Энергетические зоны в кристаллах. Свободные электроны в металле — это модель поведения электронов в первом приближении. Уточнение этой модели сводится к учету того, что электроны на самом деле движутся в периодическом поле, и это приводит к появлению нового явления. А именно, квазинепрерывный энергетический спектр электронов распадается на ряд разрешенных и запрещенных зон.

Каждая из разрешенных зон состоит из N близко расположенных уровней, число которых равно количеству атомов в кристалле. Ширина зон ($3 + 5$ эВ) не зависит от размеров кристалла. Происхождение этих зон связано с энергетическими уровнями изолированных атомов. При образовании кристалла каждый уровень атома распадается на N уровней. Особенно сильно расщеплению подвергаются вышележащие энергетические уровни атома, и в частности, уровень с внешним валентным электроном. В результате возникает особенно интересующая нас **валентная зона**, уровни которой заполнены наполовину, если в соответствующем атоме был один валентный электрон. Наполовину, потому что на каждом уровне могут располагаться по два электрона с противоположно направленными спинами. Если же валентных электронов у атома два, то валентная зона будет заполнена полностью. Впрочем, возможны случаи, когда две зоны, образованные из двух соседних уровней атома, перекрываются, и образуется зона, содержащая $2N$ уровней.

Зону, расположенную над валентной, называют *свободной*.

В зависимости от степени заполнения валентной зоны электронами и ширины ΔE запрещенной зоны кристаллы подразделяют на *металлы*, *полупроводники* и *диэлектрики* (рис. 4.7). На рисунке тонирована та часть энергетического спектра, которая полностью заполнена электронами (по два на уровень). Это распределение соответствует температуре $T = 0$. При этой температуре все электроны совершают внутренние квантовые движения, никак при этом себя не проявляя.



В **металлах**, как мы уже знаем, достаточно сообщить электронам, находящимся на верхних уровнях, небольшую энергию (повышая температуру или прикладывая внешнее электрическое поле E), чтобы перевести их на более высокие уровни, где они проявляют себя или в теплоемкости или в электропроводности.

У **полупроводников** дело обстоит иначе, и электроны могут себя так или иначе проявить лишь в случае, если им будет сообщена энергия, превышающая энергию ΔE запрещенной зоны, чтобы перевести их с верхних уровней заполненной валентной зоны в свободную зону (у полупроводников ΔE порядка нескольких десятых эВ). Свободная зона станет для таких электронов *зоной проводимости*. Одновременно могут себя проявлять и электроны на верхних уровнях валентной зоны, поскольку эти уровни частично освобождаются.

широко используются.

Распределение электронов по уровням в свободной и валентной зонах описывается функцией Ферми-Дирака (4.2). Графически это показано на рис. 4.8. Соответствующий расчет дает, что уровень Ферми при этом расположен посередине запрещенной зоны, как это и показано на рисунке.

Уровни свободной зоны (с электронами) находятся на «хвосте» распределения $f(\epsilon)$. Это означает, что $\epsilon - \epsilon_F \approx \Delta E/2$. С учетом последнего соотношения и того, что $\Delta E \gg kT$, вероятность $f(\epsilon)$ заполнения уровней в свободной зоне, т.е. формулу (4.4), где $\mu = \epsilon_F$, можно записать как

$$f(\epsilon) \propto e^{-\Delta E/2kT}. \quad (4.19)$$

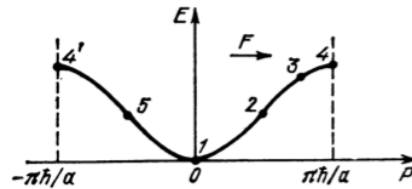


Рис. 128. Модельный закон дисперсии для электрона в кристалле

В окрестности точек $E = E_{\min}$ (точка 1) и $E = E_{\max}$ (точки 4 и 4' на рис. 128) зависимость энергии от импульса в первом приближении носит квадратичный характер. В окрестности точки 1 она может быть изображена в виде

$$E = p^2/2m^* \quad (12.35)$$

(коэффициент параболы $1/2m^* > 0$), а в окрестности точек 4 и 4'

$$E = E_4 + \frac{(p - p_4)^2}{2m^*}, \quad E = E_{4'} + \frac{(p - p_{4'})^2}{2m^*} \quad (12.35')$$

(коэффициент параболы $1/2m^* < 0$).

В обоих случаях формула (12.34) приобретает привычный вид

$$v = p/m^*, \quad (12.36)$$

если отсчитывать импульс от вершины параболы. При таком отсчете импульса формулы (12.35), (12.35') и (12.36) совпадают с обычными формулами классической механики. Однако вместо массы свободного электрона m_e в них стоит его эффективная масса m^* , которая в центре зоны положительна, а у краев — отрицательна. При слабой связи, изображенной на рис. 127, эффективная масса электрона в центре зоны близка к массе свободного электрона. В реальных случаях связь не слаба, и эти массы могут отличаться в десятки и даже сотни раз.

Формула (12.35) описывает зависимость энергии от импульса вблизи минимума потенциальной энергии лишь в изотропном случае. Если кристалл не изотропен (не обладает кубической симметрией), то эта зависимость имеет более сложный вид:

$$E = \frac{p_x^2}{2m_x^*} + \frac{p_y^2}{2m_y^*} + \frac{p_z^2}{2m_z^*}. \quad (12.35'')$$

Эффективная масса электрона при этом зависит от направления. Вместо (12.36) имеем

$$p_x = m_x^* v_x, \quad p_y = m_y^* v_y, \quad p_z = m_z^* v_z. \quad (12.36')$$

7.1 Гамильтониан. Определение энергетического спектра системы как задача на собственные значения оператора Гамильтона. Дискретный и непрерывный спектр. И1(87-90, 116-117).

Уравнение Шредингера имеет следующий вид:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U\Psi, \quad (4.5)$$

Для нахождения функции $\psi(\mathbf{r})$ в стационарных состояниях подставим выражение (4.6) в уравнение (4.5), и мы получим

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi = E\psi. \quad (4.8)$$

Собственные состояния. В предыдущей главе мы решали задачу о нахождении ψ -функций частицы в состояниях, где полная энергия имеет вполне определенные значения (в этом заключается суть квантования). Такие состояния и называют *собственными*.

Одним из основных постулатов квантовой теории является утверждение, что *состояние, в котором физическая величина Q имеет определенное значение, описывается ψ -функцией, являющейся решением уравнения*

$$\hat{Q}\psi = Q\psi, \quad (5.16)$$

где \hat{Q} — оператор физической величины Q.

Убедимся, что это уравнение правильно решает поставленную задачу. Для этого найдем среднее значение Q в состоянии, которое описывается ψ -функцией, удовлетворяющей уравнению (5.16):

$$\langle Q \rangle = \int \psi^* \hat{Q} \psi dV = \int \psi^* Q \psi dV = Q \int \psi^* \psi dV = Q.$$

Условия же, которые накладывает квантовая теория на решения уравнения (5.16), имеют несколько иной характер: физический смысл могут иметь лишь такие решения, которые всюду *конечные, однозначные, непрерывные и гладкие*. Эти условия, как уже говорилось, называют *естественными* или *стандартными*.

Пример. Найдем с помощью уравнения (5.16) ψ -функцию состояния, в котором проекция импульса на ось X имеет определенное значение p_x .

Для этого подставим в (5.16) в качестве оператора \hat{Q} оператор \hat{p}_x (5.6). Тогда

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} = p_x \psi.$$

Этому уравнению и всем необходимым условиям удовлетворяет функция

$$\psi = e^{ikx}, \quad \text{где } k = p_x/\hbar,$$

которая является координатной частью плоской волны де-Бройля.

Функции, являющиеся решением уравнения (5.16) и удовлетворяющие естественным условиям, называют *собственными функциями* оператора \hat{Q} . Те значения Q, при которых такие решения существуют, называют *собственными значениями* физической величины Q. При этом набор собственных значений для оператора Q определяет значения Q, которые могут быть найдены из опыта при измерении данной физической величины.

Набор собственных значений физической величины Q иногда оказывается непрерывным, а иногда дискретным. Опыт показывает, что в последнем случае измеренные значения Q действительно оказываются дискретными и совпадают с собственными значениями Q. Примером дискретности в микромире являются оптические спектры атомов, которые состоят из ряда отдельных тонких линий.

Уравнение (5.16) является обобщением правила квантования энергии, рассмотренного в предыдущей главе, на случай любых физических величин. Чтобы убедиться в этом, подставим (5.9) — оператор \hat{H} в (5.16):

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U \right) \psi = E\psi. \quad (5.17)$$

Это уравнение Шредингера (4.3) для стационарных состояний. Поэтому сокращенно его можно записать в символической форме

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad (5.18)$$

отличающейся от (5.16) только обозначениями.

Собственные функции оператора x

$$x\psi_{x'}(x) = x'\psi_{x'}(x)$$

$$\psi_{x'}(x) = \delta(x - x')$$

Собственные функции оператора импульса

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

$$\psi_p(x, t) = C(t)e^{i px} = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)} \quad \text{волна де Бройля}$$

$$\langle p \rangle = \int \psi_p(x, t)^* \hat{p} \psi_p(x, t) dx = p \int \psi_p(x)^* \psi_p(x) dx = p$$

$$\psi_p(x) = \sqrt{\frac{1}{L}} e^{i px} \quad x \in (-L/2, L/2) \quad \text{Нормировка в "ящике"}$$

$$I = \int_{-L/2}^{L/2} \psi_{p'}(x)^* \psi_p(x) dx = \frac{1}{L} \int \exp\left\{ \frac{i}{\hbar}(p - p')x \right\} dx = \frac{\sin(\Delta k L / 2)}{\Delta k L / 2}$$

$$\Delta k = (p - p')/\hbar \quad \Delta k = 0 \Rightarrow I = 1 \quad \Delta k \neq 0 \Rightarrow I = 0$$

$$\text{Нормировка на } \delta\text{- функцию} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i \frac{(p-p')x}{\hbar}} dx = 2\pi\hbar \delta\left(\frac{p-p'}{\hbar}\right) = 2\pi\hbar \delta(p-p')$$

Непрерывный спектр. Нормировка на δ - функцию

Разложение волновой функции по ортонормированному базису
Дискретный спектр **Непрерывный спектр (оператора импульса)**

$$\psi(x) = \sum_n C_n \varphi_n(x)$$

$$\psi(x) = \int C(p') \varphi_{p'}(x) dp'$$

$$C_n = \int \varphi_n^*(x) \psi(x) dx$$

$$C(p) = \int \varphi_p^*(x) \psi(x) dx$$

$$\sum_n C_n^2 = 1$$

$$C(p) = \int dp' C(p') \int \varphi_p^* \varphi_{p'}(x) dx$$

$$\int \varphi_n^* \varphi_m(x) dx = \delta_{nm}$$

$$\Rightarrow \int \varphi_p^* \varphi_{p'}(x) dx = \delta(p - p')$$

$$P(n) = C_n^2$$

$$P(p, p + dp) = C(p)^2 dp$$

Вероятность n-го состояния

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i \frac{(p-p')x}{\hbar}} dx = 2\pi\hbar \delta\left(\frac{p-p'}{\hbar}\right) = 2\pi\hbar \delta(p-p')$$

$$\varphi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i \frac{p}{\hbar} x} \quad \varphi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$$

7.2 Решеточная теплоемкость твердого тела. Классическая модель. Модель Эйнштейна. И2(117-119).

Классическая модель. В основе классической теории теплоемкости твердых тел (кристаллов) лежит закон равномерного распределения энергии по степеням свободы. Твердое тело рассматривают как систему N независимых друг от друга атомов, имеющих по три колебательных степени свободы. На каждую из них приходится в среднем энергия kT ($kT/2$ в виде кинетической и $kT/2$ в виде потенциальной). Имея в виду, что число колебательных степеней свободы равно $3N$, получим, что внутренняя энергия одного моля атомов $U = 3N_A kT = 3RT$. Отсюда молярная теплоемкость

$$C = \partial U / \partial T = 3R. \quad (4.35)$$

В этом суть закона Дюлонга и Пти, который утверждает, что молярная теплоемкость всех химически простых твердых тел одинакова и равна $3R$. Этот закон выполняется достаточно хорошо только при сравнительно высоких температурах. Опыт показывает, что при низких температурах теплоемкость тел убывает (рис. 4.13), стремясь к нулю при $T \rightarrow 0$ по закону $C \propto T^3$.

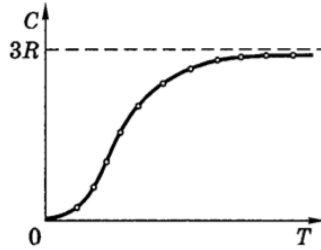


Рис. 4.13

Модель Дебая. В этой модели кристаллическая решетка рассматривается как *связанная* система взаимодействующих атомов. Колебания такой системы — результат наложения многих гармонических колебаний с различными частотами. Под гармоническим осциллятором той или иной частоты теперь надо понимать колебания не отдельного атома, а всей системы в целом. Задача сводится к нахождению спектра частот этих осцилляторов. Это весьма сложно. Дебай сильно упростил задачу. Он обратил внимание на то, что при низких температурах основной вклад в теплоемкость вносят колебания (осцилляторы) низких частот, которым соответствуют малые кванты энергии $h\nu$. Практически только такие колебания и возбуждены при низких температурах. Низкочастотный же спектр колебаний решетки может быть рассчитан достаточно точно, и вычисления оказываются довольно простыми. Таким путем Дебай построил теорию теплоемкости твердых тел, особенно хорошо согласующуюся с опытом при низких температурах. Из теории следовало, что при $T \rightarrow 0$ действительно $C \propto T^3$.

Мы не будем воспроизводить подробно рассуждения Дебая. Чтобы получить результаты, к которым пришел Дебай, мы поступим иначе.

Модель Эйнштейна.

Ботанной Эйнштейном, кристалл рассматривался как система

N атомов, каждый из которых является квантовым гармоническим осциллятором. Предполагалось, что колебания атомов происходят *независимо* друг от друга с *одинаковой* частотой ν .

Энергия квантового гармонического осциллятора дискретна:

$$\epsilon_\nu = (\nu + 1/2) h\nu, \quad \nu = 0, 1, 2, \dots \quad (4.36)$$

Можно показать (см. решение задачи 4.8), что средняя энергия такого осциллятора

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{h\nu}{2} + \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}. \quad (4.37)$$

Первое слагаемое здесь — это так называемая *нулевая энергия* данного осциллятора. Она не зависит от T и не имеет отношения к тепловому движению. Поэтому в теории теплоемкости тел ее можно опустить и выражение для внутренней энергии одного моля будет иметь вид:

$$U = 3N_A \langle \epsilon \rangle = 3N_A \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}. \quad (4.38)$$

Теперь можно найти молярную теплоемкость кристаллической решетки:

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{3R(h\nu/kT)^2}{(e^{h\nu/kT} - 1)^2} e^{h\nu/kT}. \quad (4.39)$$

Это выражение называют *формулой Эйнштейна*.

При высоких температурах ($kT \gg h\nu$) она переходит в формулу (4.35). При низких же температурах ($kT \ll h\nu$) можно пренебречь единицей в знаменателе, и

$$C = 3R(h\nu/kT)^2 e^{-h\nu/kT}. \quad (4.40)$$

8.2 Многоэлектронные атомы. Заполнение атомных состояний электронами. Атомные оболочки и подоболочки. Электронная конфигурация. И1(149-158).

Пусть атом находится в невозбужденном состоянии. Выясним, в каких состояниях при этом могут находиться его электроны.

По мере увеличения порядкового номера Z атома происходит последовательное строго определенное заполнение электронных уровней атома. Объяснение такого порядка заполнения уровней нашёл Паули (1940). Это было великое открытие, названное впоследствии *принципом Паули*:

в любом квантовом состоянии может находиться не более одного электрона.

Поэтому каждый следующий электрон невозбужденного атома должен занимать самый глубокий из ещё незаполненных уровней. Тщательная проверка явилась убедительным подтверждением принципа Паули.

Другими словами, *в атоме (и в любой квантовой системе) не может быть электронов с одинаковыми значениями всех четырёх квантовых чисел.*

В § 6.3 было показано, что данному значению n соответствует $2n^2$ состояний, отличающихся друг от друга значениями квантовых чисел l, m_l, m_s . Совокупность электронов атома с одинаковыми значениями квантового числа n , образуют так называемую оболочку. В соответствии со значением n оболочки обозначают большими буквами латинского алфавита следующим образом:

Значение n	1	2	3	4	5	6
Оболочка	<i>K</i>	<i>L</i>	<i>M</i>	<i>N</i>	<i>O</i>	<i>P</i>

Оболочки подразделяют на *подоболочки**, отличающиеся квантовым числом l . Различные состояния в подоболочке отличаются значениями квантовых чисел m_l и m_s . Число состояний в подоболочке равно $2(2l + 1)$. Подоболочки обозначают или большой латинской буквой с числовым индексом (*K, L₁, L₂, ...*) или в виде

$$1s; 2s, 2p; 3s, 3p, 3d; \dots,$$

где цифра означает квантовое число n , т. е. принадлежность к соответствующей оболочке (*K, L, M, ...*).

Возможные состояния электронов в атоме и их распределение по оболочкам и подоболочкам показано в табл. 6.6, в которой вместо обозначений $m_s = +1/2$ и $-1/2$ использованы для наглядности стрелки \uparrow и \downarrow . Видно, что число возможных состояний в *K, L, M, ...* оболочках равно соответственно 2, 8, 18, ..., т. е. равно $2n^2$.

Оболочка	<i>K</i>		<i>L</i>			<i>M</i>								
	1s	2s	2p		3s	3p		3d						
m_l	0	0	+1	0	-1	0	+1	0	-1	+2	+1	0	-1	-2
m_s	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
Число электронов	2	2	6			2	6		10					

Полностью заполненные оболочки и подоболочки имеют $L = 0$ и $S = 0$, значит и $J = 0$. Например, 3*d*-подоболочка: суммарное квантовое число $m_L = \sum m_l = 0$, и это единственное значение, поэтому $L = 0$. Аналогично относительно спина. Значит, действительно, $J = 0$.

Это важный результат: при определенных квантовых числах L и S атома заполненные подоболочки можно не принимать во внимание (мы это уже использовали в случае атомов щелочных металлов).

1. Распределение электронов по состояниям называют *электронной конфигурацией*. Их обозначают символически, например, так:

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s.$$

Это означает, что в атоме имеются два 1*s*-электрона, два 2*s*²-электрона, шесть 2*p*-электронов и один 3*s*-электрон. Из таблицы 6.7 видно, что это — электронная конфигурация атома Na.

2. Оболочку (или подоболочку), полностью заполненную электронами, называют *замкнутой*. В предыдущем параграфе мы установили, что все три квантовых числа (L, S, J) у замкнутых оболочек (и подоболочек) равны нулю. Основными термами таких оболочек являются ¹*S*₀. В таблице 6.7 это у атомов He, Be, Ne, Mg и др.

Электроны в каждой подоболочке называют *эквивалентными*, у них одинаковые значения n и l .

3. Вплоть до атома калия *K* последовательность заполнения оболочек и подоболочек имеет «идеальный» характер. Первый «сбой» происходит с атомом *K*: внешний электрон занимает, вместо 3*d*-состояния, 4*s*. Подобное — не единственный случай в периодической системе, и связано это с тем, что такие конфигурации оказываются более выгодными в энергетическом отношении (расчет это полностью подтвердил).

4. Наблюдаемая периодичность химических и ряда физических свойств атомов объясняется поведением *внешних* валентных электронов. Выяснилось, что эта периодичность связана с определенной периодичностью электронной конфигурации атомов, в частности, с конфигурацией внешних электронов.

5. В правой колонке табл. 6.7 приведены основные термы атомов. Для первых четырех атомов определение основного состояния не вызывает трудности — для этого достаточно принципа Паули. Но уже для бора *B* возникает неопределенность: одному *p*-электрону соответствует $l = 1$ и $s = 1/2$, откуда $j = 3/2$ или $1/2$, т. е. два состояния: *P*_{3/2} и *P*_{1/2}. Какое из них является основным, можно решить лишь с помощью *правил Хунда*.

Правила Хунда. Это полумпирические правила, относящиеся к системе эквивалентных электронов (у них n и l одинаковы), т. е. для электронов, находящихся в одной подоболочке. Этих правил два:

1. Минимальной энергией данной электронной конфигурации обладает терм с наибольшим возможным значением спина S и с наибольшим возможным при таком S значением L .

2. При этом квантовое число

$$J = \begin{cases} L - S, & \text{если подоболочка заполнена менее, чем наполовину,} \\ L + S & \text{в остальных случаях.} \end{cases}$$

Применим эти правила к *p*-оболочке. В ней всего могут находиться $2(2l + 1) = 6$ электронов. Возьмем, например, атом кислорода *O* (у него электронная конфигурация, как видно из табл. 6.7, имеет вид $1s^2 2s^2 p^4$), т. е. *p*-подоболочка заполнена не полностью. Изобразим состояние с различными значениями m_l . Для *p*-подоболочки это будут $+1/2, 0$ и $-1/2$, т. е. три ячейки:

m_l	+1/2	0	-1/2
m_s	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	\uparrow

8.1 Уравнение Шредингера. Свободное движение частицы. Плотность потока вероятности. Потенциальные барьеры. Коэффициенты отражения и пропускания. И1(100-103).

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) \psi = 0.$$

Сначала рассмотрим простейший случай — прямоугольный потенциальный барьер, когда потенциальная энергия U зависит только от одной координаты x , причем при $x = 0$ претерпевает скачок (рис. 4.11). У такого барьера

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x < 0, \\ U_0 & \text{при } x > 0. \end{cases} \quad (4.25)$$

Пусть слева на границу барьера налетает с полной энергией E частица или поток частиц. На языке квантовой теории это означает, что на барьер слева «падает» дебройлевская волна

$$\Psi(x, t) = a e^{i(kx - \omega t)}. \quad (4.26)$$

$$\psi_x'' + k^2 \psi = 0, \quad k^2 = 2m(E - U_0)/\hbar^2. \quad (4.27)$$

Здесь возможны два случая (см. рис. 4.11): $E > U_0$ и $E < U_0$.

1. В случае $E > U_0$ общее решение уравнения (4.27) имеет вид:

$$\begin{aligned} \psi_1(x \leq 0) &= a_1 \exp(ik_1 x) + b_1 \exp(-ik_1 x), \quad k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar, \\ \psi_2(x \geq 0) &= a_2 \exp(ik_2 x) + b_2 \exp(-ik_2 x), \quad k_2 = \sqrt{2m(E - U_0)}/\hbar. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Будем считать, что падающая волна характеризуется амплитудой a_1 , причем вещественной, а отраженная — амплитудой b_1 . В области $x > 0$ имеется только проходящая волна, поэтому

$b_2 = 0$. Из условия непрерывности ψ и ψ'_x в точке $x = 0$ следует, что

$$\begin{aligned} \psi_1(0) &= \psi_2(0), \quad \text{или } a_1 + b_1 = a_2, \\ \psi_1'(0) &= \psi_2'(0), \quad \text{или } a_1 k_1 + b_1 k_1 = a_2 k_2. \end{aligned} \quad (4.29)$$

Из совместного решения этих двух уравнений находим, что отношения амплитуд отраженной и прошедшей волн к амплитуде a_1 падающей волны равны:

$$\frac{b_1}{a_1} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}, \quad \frac{a_2}{a_1} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}. \quad (4.30)$$

Для определения интересующих нас коэффициентов R и D введем понятие *плотности потока вероятности* \mathcal{P} . Скорость распространения вероятности такого потока просто совпадает с классической скоростью v частицы, и мы можем написать $v = p/m = \hbar k/m$, поскольку согласно (3.1) $p = \hbar k$. Таким образом,

$$v \propto k,$$

и плотность потока вероятности пропорциональна величине $k\psi\psi^*$:

$$\mathcal{P} \propto k\psi\psi^*.$$

В соответствии с видом Ψ -функции (4.26) для падающей, отраженной и прошедшей волн мы имеем

$$\mathcal{P} \propto k_1 a_1^2, \quad \mathcal{P}' \propto k_1 b_1^2, \quad \mathcal{P}'' \propto k_2 a_2^2.$$

Теперь можно записать выражения для коэффициентов отражения R и пропускания D :

$$R = \frac{\mathcal{P}'}{\mathcal{P}} = \left(\frac{b_1}{a_1} \right)^2 = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2, \quad D = \frac{\mathcal{P}''}{\mathcal{P}} = \frac{k_2}{k_1} \left(\frac{a_2}{a_1} \right)^2 = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}. \quad (4.31)$$

Отсюда следует, что $R + D = 1$, что и должно быть по определению. Кроме того, видно, что значения R и D не зависят от направления движения частицы: слева направо на рис. 4.11 или наоборот.

Заметим, что в классическом случае $R = 0$ при $E > U_0$.

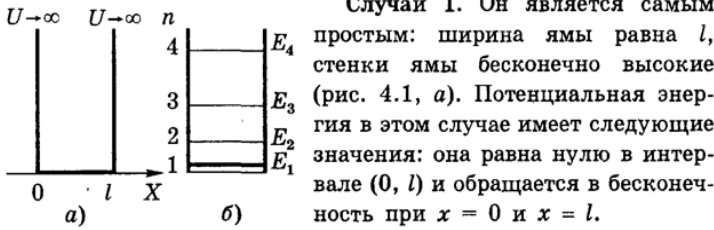
2. В случае $E < U_0$ формулы (4.30) остаются справедливыми. Однако k_2 будет чисто мнимым согласно (4.28). При этом выражение (4.31) для коэффициента отражения следует записать так:

$$R = \left| \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right|^2. \quad (4.32)$$

9.1 Уравнение Шредингера. Частица в прямоугольной потенциальной яме конечной глубины. Принцип неопределенности. И1(93-96).

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0.$$

рации — два случая. Предполагается, что частица может двигаться только вдоль оси X .



Случай 1. Он является самым простым: ширина ямы равна l , стенки ямы бесконечно высокие (рис. 4.1, а). Потенциальная энергия в этом случае имеет следующие значения: она равна нулю в интервале $(0, l)$ и обращается в бесконечность при $x = 0$ и $x = l$.

Исходим из уравнения Шредингера (4.9). Для одномерного случая в пределах ямы (где $U = 0$) это уравнение упрощается:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k^2 \psi = 0, \quad (4.10)$$

где введено обозначение

$$k^2 = 2mE/\hbar^2. \quad (4.11)$$

Общее решение уравнения (4.10) имеет вид

$$\psi(x) = a \sin(kx + \alpha), \quad (4.12)$$

где a и α — произвольные постоянные.

Теперь самое главное: мы должны потребовать от функции $\psi(x)$, чтобы она удовлетворяла естественным (стандартным) условиям. Видно, что $\psi(x)$ в виде (4.12) однозначна и конечна. Она должна быть еще и непрерывной, а именно, вне ямы частица быть не может, значит там $\psi(x) = 0$, и для непрерывности ψ -функции необходимо, чтобы при $x = 0$ и $x = l$ функция (4.12) была бы равна нулю. Из условия

$$\psi(0) = a \sin \alpha = 0$$

следует, что $\alpha = 0$. Из условия же

$$\psi(l) = a \sin kl = 0$$

в свою очередь следует, что

$$kl = \pm n\pi, \quad (4.13)$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$ ($n = 0$ отпадает, так как при этом $\psi = 0$ — частицы вообще нет).

Подставив k из (4.13) в (4.11), получим

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.14)$$

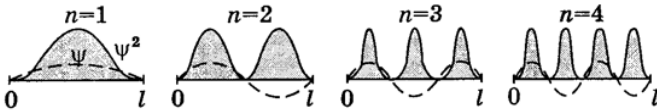


Рис. 4.2

Итак, собственные значения E мы нашли — это (4.14). Теперь найдем соответствующие им собственные функции. Для этого подставим значения k из (4.13) в (4.12), где $\alpha = 0$, тогда

$$\psi(x) = a \sin(n\pi x/l).$$

Для определения коэффициента a воспользуемся условием нормировки (4.3). В нашем случае оно примет вид

$$a^2 \int_0^l \sin^2 \frac{n\pi x}{l} dx = 1.$$

На концах интервала $(0, l)$ подынтегральная функция равна нулю, поэтому значение интеграла можно представить как произведение среднего значения квадрата синуса (а оно равно $1/2$) на ширину ямы l :

$$a^2(1/2)l = 1,$$

откуда $a = \sqrt{2/l}$.

Таким образом, собственные функции в данном случае имеют вид

$$\psi_n(x) = \sqrt{2/l} \sin(n\pi x/l), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.15)$$

Наиболее важными являются два соотношения неопределенностей.

Первое из них ограничивает точности *одновременного* измерения координат и соответствующих проекций импульса частицы. Для проекции, например, на ось X оно выглядит так*:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar. \quad \Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar. \quad (3.20)$$

Второе соотношение устанавливает неопределенность измерения энергии, ΔE , за данный промежуток времени Δt :

Согласно второму соотношению (3.21) для измерения энергии с погрешностью ΔE необходимо время, не меньшее, чем $\Delta t \approx \hbar/\Delta E$. Примером может служить «размытие» энергетических уровней водородоподобных систем (кроме основного состояния). Это связано с тем, что время жизни во всех возбужденных состояниях этих систем порядка 10^{-8} с. Размытие же уровней приводит к уширению спектральных линий (*естественное уширение*), которое действительно наблюдается. Сказанное от

9.2 Квантование момента импульса (пространственное квантование). Собственные значения операторов квадрата углового момента L^2 и его проекции L_z . Правила сложения невзаимодействующих угловых моментов. И1(118-122, 145-146).

Момент импульса. Момент импульса M является одной из важнейших характеристик движения. Его значение связано с тем, что M сохраняется, если система изолирована или движется в центральном силовом поле. Однако в квантовой теории момент импульса существенно отличается от классического. А именно, модуль момента импульса может быть задан сколь угодно точно только с одной из проекций, например, M_z . Другие две проекции оказываются полностью неопределенными.

Это означает, что направление момента M в пространстве является неопределенным. Наглядно подобную ситуацию можно попытаться представить так: вектор M как-то «размазан» по образующим конуса, ось которого совпадает с направлением координатной оси Z (рис. 5.1). В этом случае вполне определенное значение имеет лишь проекция M_z . Другие две проекции, M_x и M_y , оказываются полностью неопределенными.

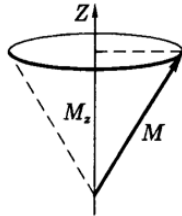


Рис. 5.1

Говоря в дальнейшем о «векторе» момента, мы будем иметь в виду именно такой квантовый смысл этой величины.

В этой главе мы ограничимся рассмотрением момента для одного электрона. В дальнейшем же по мере усложнения системы выясним, как это отразится на моменте системы (§ 6.4).

Модуль момента импульса. Начнем с квадрата момента. Согласно (5.13) для этого необходимо решить уравнение

$$\hat{M}^2 \psi = M^2 \psi. \quad (5.19)$$

Оператор \hat{M}^2 достаточно сложный, и решение этого уравнения является очень громоздким. Поэтому мы ограничимся приведением окончательных результатов, причем только для собственных значений данного оператора:

$$M^2 = l(l+1) \hbar^2, \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad (5.20)$$

где l — так называемое *орбитальное* (или *азимутальное*) квантовое число. Отсюда модуль момента

$$M = \hbar \sqrt{l(l+1)}, \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (5.21)$$

Видно, что эта величина является дискретной (квантованной).

Это значит, что оператор момента импульса зависит только от направления координатных осей. Поэтому его лучше называть *оператором углового момента*.

Проекция момента M_z . Поскольку в одном и том же состоянии проекции момента на два различных направления не могут иметь определенные значения, то избранное направление можно взять произвольно. Такое направление обычно принимают за ось Z , так как в этом случае оператор \hat{M}_z дается более простой формулой (5.12).

Таким образом, для определения собственных значений и собственных функций этого оператора надо, согласно (5.16), решить уравнение

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi = M_z \psi. \quad (5.22)$$

Подстановка $\psi = Ce^{i\alpha\varphi}$ приводит после сокращения на общий множитель $e^{i\alpha\varphi}$ к уравнению $-i\hbar\alpha = M_z$, из которого $\alpha = iM_z/\hbar$. Значит, решение уравнения (5.22) таково:

$$\psi = Ce^{im\varphi}, \quad m = M_z/\hbar. \quad (5.23)$$

Эта функция конечна, непрерывна и гладкая. Она должна быть и однозначной, для чего должно быть выполнено условие

$$\psi(\varphi + 2\pi) = \psi(\varphi).$$

Данное условие выполняется только при целых значениях m в (5.23).

Следовательно, проекция углового момента на ось Z является кратной постоянной Планка:

$$M_z = m\hbar, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (5.24)$$

пространстве. По причинам, которые выясняются в дальнейшем (§ 7.1), число m называют *магнитным квантовым числом*.

С точки зрения квантовой теории волновая функция ψ_l , соответствующая определенному квантовому числу l , представляет собой суперпозицию состояний (ψ_{lm} -функций), отличающихся друг от друга квантовым числом m . Иначе говоря, состояние с заданным l является вырожденным по m , причем кратность вырождения, т. е. число различных значений m , как следует из (5.24), равно $2l + 1$. Как будет пока-

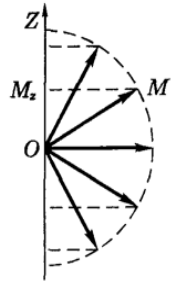


Рис. 5.2

Проекция вектора не может быть больше модуля этого вектора, т. е. $|M_z| \leq M$, поэтому в соответствии с (5.20) и (5.21) должно выполняться условие

$$|m| \leq \sqrt{l(l+1)}.$$

$$\begin{aligned} M &= \hbar \sqrt{l(l+1)}, \quad l = 0, 1, 2, \dots \\ M_z &= \hbar m, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l. \end{aligned}$$

Символически это записывают так: $M_j = M_l + M_s$, где j — *квантовое число полного момента*.

Правила сложения угловых моментов в квантовой теории не зависят от того, являются ли моменты орбитальными или спиновыми. Поэтому полный момент электрона M_j определяется формулой, аналогичной формулам для орбитального и спинового моментов, а именно

$$M_j = \hbar \sqrt{j(j+1)}, \quad j = l + s = l \pm 1/2. \quad (6.26)$$

Таким образом, квантовое число j является *полуцелым*, поскольку l — целое, причем, если $l = 0$, то $j = s = 1/2$. Кроме того, j всегда положительно.

В связи со знаками \pm перед спином s в (6.26) условно принято говорить, что спиновый момент либо «сонаправлен» с орбитальным моментом (знак +), либо они взаимно противоположны «по направлению» (знак -).

Возможные проекции момента (6.26) на ось Z определяются как

$$M_{jz} = \hbar m_j, \quad m_j = j, j-1, j-2, \dots, -j, \quad (6.27)$$

т. е. при данном j возможны $2j + 1$ квантовых состояний, отличающихся значениями m_j . Например, при $l = 1$

$$\begin{aligned} j_1 &= 1 + 1/2 = 3/2, & m_j &= 3/2, 1/2, -1/2, -3/2, \\ j_2 &= 1 - 1/2 = 1/2, & m_j &= 1/2, -1/2. \end{aligned}$$

10.1 Уравнение Шредингера. Гармонический осциллятор. Уровни энергии и волновые функции стационарных состояний. Нулевая энергия. И1(96-99).

Задача об уровнях энергии одномерного гармонического осциллятора является одной из наиболее важных задач о собственных значениях.

В квантовой теории понятие силы теряет смысл (см. сноску на стр. 85), поэтому квантовый гармонический осциллятор следует определить как поведение частицы массы m с потенциальной энергией $U(x)$ такой же, как у классического осциллятора, а именно

$$U = \kappa x^2/2,$$

где κ — постоянная. Графиком функции (4.20) является парабола (рис. 4.6). Согласно классической механике осциллятор совершает гармонические колебания с циклической частотой

$\omega = \sqrt{\kappa/m}$. В квантовой теории это равенство следует рассматривать просто как введение некоторой новой постоянной (и не более), однако, как будет видно в дальнейшем, это делается неспроста. Сейчас же, выразив в формуле (4.20) κ через ω и m , получим

$$U = \frac{m\omega^2}{2} x^2. \quad (4.21)$$

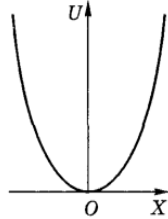


Рис. 4.6

Теперь обратимся к уравнению Шредингера (4.9), которое в нашем одномерном случае будет иметь вид

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) \psi = 0. \quad (4.22)$$

Нахождение решения этого уравнения, т. е. ψ -функции, является громоздкой математической задачей. Для нас главное не в этом. Оказывается, уравнение (4.22) имеет конечные, однозначные, непрерывные и гладкие решения (собственные функции) при собственных значениях E , равных

$$E_v = \left(v + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega, \quad v = 0, 1, 2, \dots \quad (4.23)$$

Схема соответствующих энергетических уровней (4.23) дана на рис. 4.7. Видно, что эти уровни — эквидистантны, т. е. отстоят друг от друга на одинаковую величину. Минимальная энергия $E_0 = \hbar\omega/2$, ее называют *нулевой энергией*.

То, что минимальная энергия квантового осциллятора не равна нулю (частица не может «лежать» в нижней точке параболической потенциальной ямы), связано с принципом неопределенности, как и в случае прямоугольной ямы. Если бы энергия частицы была равна нулю, то частица покоилась бы, и ее импульс и координаты имели бы одновременно определенные значения, что противоречит принципу неопределенности.

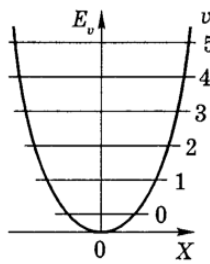


Рис. 4.7

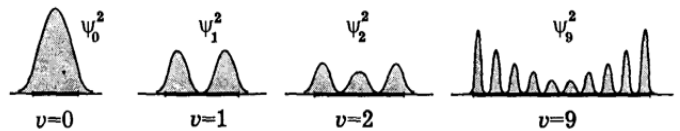
Наличие нулевой энергии подтверждается экспериментально.

Более детальный расчет, выходящий за рамки уравнения Шредингера, показывает, что для квантового осциллятора возможны переходы лишь между *соседними* «стационарными» уровнями, при которых квантовое число v изменяется на единицу:

$$\Delta v = \pm 1. \quad (4.24)$$

Это условие называют *правилом отбора* для квантового гармонического осциллятора.

При каждом из этих переходов испускается или поглощается фотон с энергией $\hbar\omega$, где ω — его циклическая частота. Именно здесь введенная ранее постоянная ω приобретает физический смысл. Говорить же, что в стационарных состояниях квантовый осциллятор испытывает колебания с частотой ω , это в принципе неверно. Дело обстоит совершенно иначе. Поясним это с помощью рис. 4.8, где приведены графики распределения плотности вероятности $\psi^2(x)$ местоположения частицы при $v = 0, 1, 2$ и при большом значении v . Жирными отрезками на оси X показаны интервалы, на концах которых $E = U$. Классическая частица при колебаниях за пределы интервала заходить не может. Квантовая же частица ведет себя совершенно не так. Она, как видно из рисунка, может быть обнаружена и вне пределов этих интервалов, где $E < U$. И ни о каких колебаниях квантового осциллятора в стационарных состояниях речи быть не может. Мы можем говорить лишь о распределении плотности вероятности местоположения частицы. С ростом квантового числа квантовый осциллятор все больше становится классическим, у которого плотность вероятности плавно изменяется от минимума при $x = 0$ до бесконечности в точках поворота (где $E = U$), т. е. совершенно противоположно тому, что мы имеем для квантового осциллятора, например, в состоянии с $v = 0$ (см. рис. 4.8).



Уравнение Шредингера



10.2 Решеточная теплоемкость твердого тела. Модель Дебая. Температура Дебая. И2(119-124).

Классическая модель. В основе классической теории теплоемкости твердых тел (кристаллов) лежит закон равномерного распределения энергии по степеням свободы. Твердое тело рассматривают как систему N независимых друг от друга атомов, имеющих по три колебательных степени свободы. На каждую из них приходится в среднем энергия kT ($kT/2$ в виде кинетической и $kT/2$ в виде потенциальной). Имея в виду, что число колебательных степеней свободы равно $3N$, получим, что внутренняя энергия одного моля атомов $U = 3N_A kT = 3RT$. Отсюда молярная теплоемкость

$$C = \partial U / \partial T = 3R. \quad (4.35)$$

В этом суть закона Дюлонга и Пти, который утверждает, что молярная теплоемкость всех химически простых твердых тел одинакова и равна $3R$. Этот закон выполняется достаточно хорошо только при сравнительно высоких температурах. Опыт показывает, что при низких температурах теплоемкость тел убывает (рис. 4.13), стремясь к нулю при $T \rightarrow 0$ по закону $C \propto T^3$.

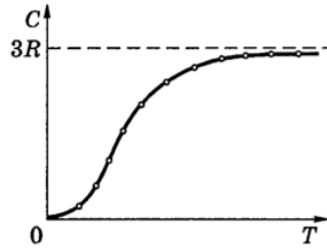


Рис. 4.13

Модель Дебая. В этой модели кристаллическая решетка рассматривается как связанная система взаимодействующих атомов. Колебания такой системы — результат наложения многих гармонических колебаний с различными частотами. Под гармоническим осциллятором той или иной частоты теперь надо понимать колебания не отдельного атома, а всей системы в целом. Задача сводится к нахождению спектра частот этих осцилляторов. Это весьма сложно. Дебай сильно упростил задачу. Он обратил внимание на то, что при низких температурах основной вклад в теплоемкость вносят колебания (осцилляторы) низких частот, которым соответствуют малые кванты энергии $h\nu$. Практически только такие колебания и возбуждены при низких температурах. Низкочастотный же спектр колебаний решетки может быть рассчитан достаточно точно, и вычисления оказываются довольно простыми. Таким путем Дебай построил теорию теплоемкости твердых тел, особенно хорошо согласующуюся с опытом при низких температурах. Из теории следовало, что при $T \rightarrow 0$ действительно $C \propto T^3$.

Мы не будем воспроизводить подробно рассуждения Дебая. Чтобы получить результаты, к которым пришел Дебай, мы поступим иначе.

$$U(T) = 3RT \cdot D\left(\frac{T_D}{T}\right),$$

$$D(x) = 3 \left(\frac{1}{x}\right)^3 \int_0^x \frac{x^3}{e^x - 1} dx$$

$$T_D = \omega_{\max} \hbar / k.$$

$T \ll T_D$ (закон Дебая):

$$C = \frac{12\pi^3}{5} R \left(\frac{T}{T_D}\right)^3 \sim T^3.$$

Теплоемкость кристалла. Зная $U(T)$, находим, что теплоемкость единицы объема кристалла

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{9n_0 \hbar^2}{kT^2 v_{\max}^3} \int_0^{v_{\max}} \frac{e^{h\nu/kT} v^4 dv}{(e^{h\nu/kT} - 1)^2}. \quad (4.49)$$

Введем так называемую *характеристическую температуру Дебая* Θ , определяемую условием

$$h\nu_{\max} = k\Theta, \quad (4.50)$$

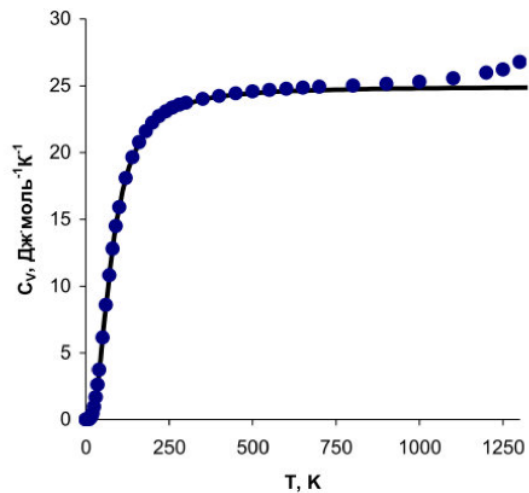
а также новую переменную $x = h\nu/kT$. Тогда выражение для теплоемкости (4.49) примет вид

$$C = 9n_0 k \left(\frac{T}{\Theta}\right)^3 \int_0^{x_m} \frac{e^x x^4 dx}{(e^x - 1)^2}, \quad (4.51)$$

где $x_m = h\nu_{\max}/kT = \Theta/T$. Выражение (4.51) называют *формулой Дебая*.

Отметим еще, что дебаевская температура Θ указывает для каждого твердого тела область температур ($T < \Theta$), где становится существенным квантование энергии колебаний.

Cu ($\theta_D = 315$ К)



Однако модель Дебая не учитывает анизотропию свойств кристаллов, реальные дисперсионные зависимости и реальные плотности распределения для фононов, существующие в разных типах кристаллических структур. Это приближение рассматривает только изотропные длинноволновые акустические фононы малой энергии, возбуждаемые при низких температурах, и никак не учитывает "оптические" фононы больших энергий, которые могут возбуждаться при высоких температурах, а также нелинейные эффекты. Поэтому при высоких температурах $T \gg T_D$ теплоемкость ряда веществ демонстрирует большие отклонения от теории Дебая (как и от классической теории Дюлонга и Пти), хорошо согласуясь с теорией лишь при малых температурах в интервале $0 < T \sim T_D$ (например, см. теплоемкость вольфрама, рис.3б).

11.1 Туннельный эффект. Туннельный микроскоп. α -распад атомных ядер. И1(102-103), БКФ4(286-297).

Туннельный эффект. Способность квантовых частиц в силу своих волновых свойств заходить под барьер приводит к так называемому *туннельному эффекту*. Он заключается в следующем. Если частица с энергией E налетает на некоторый потенциальный барьер $U(x)$, то она с определенной вероятностью может пройти *сквозь* барьер как бы по туннелю, т. е. пройти область, где $E < U$.

В качестве иллюстрации приведем результаты расчета плотности вероятности $P(x)$ местоположения частицы, налетающей слева на простейший прямоугольный потенциальный барьер, показанный на рис. 4.12. Слева от барьера мы имеем падающую и отраженную волны, а за барьером — только прошедшую волну. Внутри барьера ψ -функция имеет не волновой характер, в результате чего $P(x)$ убывает практически экспоненциально.

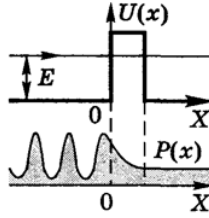


Рис. 4.12

Соответствующий расчет показывает, что в случае потенциального барьера произвольной формы (рис. 4.13) вероятность прохождения частицы сквозь барьер, т. е. *коэффициент прозрачности*

$$D \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U-E)} dx\right). \quad (4.35)$$

Это приближенное равенство, оно тем точнее, чем меньше $(U-E)$ по сравнению с E .

Туннельный эффект — специфически квантовое явление, не имеющее аналога в классической физике (где такого в принципе не может быть). Этим эффектом объясняются многие физические явления; например, холодная эмиссия электронов из металлов, альфа-распад, спонтанное деление ядер и др.

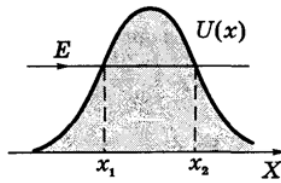


Рис. 4.13

$$T \approx \exp\left(-2a \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}\right)$$

$$T \approx T_1 \cdot T_2 \cdot T_3 \cdot T_4 \dots$$

$$\ln T = \ln T_1 + \ln T_2 + \ln T_3 + \ln T_4 + \dots$$

$$\ln T_n \approx -2 \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\frac{2m(U(x_n) - E)}{\hbar^2}} dx_n$$

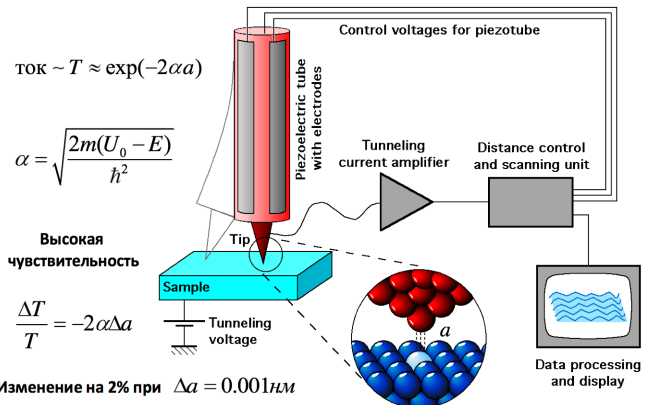
$$\ln T \approx -2 \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\frac{2m(U(x) - E)}{\hbar^2}} dx$$

$$T \approx \exp\left(-2 \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\frac{2m(U(x) - E)}{\hbar^2}} dx\right)$$

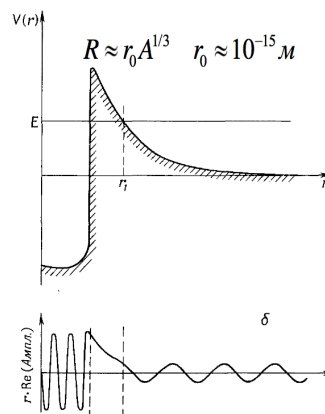
_____ (0.1 _____).

_____ $\frac{\pi A}{\hbar}$ _____

Сканирующий туннельный микроскоп (STM)



Теория α -радиоактивности



$$E_\alpha = U(r_1) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2e^2(Z-2)}{r_1}$$

$${}_{88}\text{Ra}^{226} \quad R \approx 7.3 \cdot 10^{-15} \text{ м}$$

$$E_\alpha = 4.78 \text{ МэВ} \quad r_1 = 50 \cdot 10^{-15} \text{ м}$$

$$\lambda = nT \quad n = \frac{v}{2R} \quad v = \frac{p_\alpha}{m_\alpha} = \frac{\hbar}{m_\alpha R}$$

$$\lambda \approx \frac{\hbar T}{2m_\alpha R^2} \quad T = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{r_1}^{r_2} dr \sqrt{2m_\alpha(U(r) - E_\alpha)}\right)$$

$$t_{1/2} = \frac{2m_\alpha R^2 \ln 2}{\hbar} \exp\left(\frac{4}{\hbar^4 \pi \epsilon_0} q q_\alpha \sqrt{\frac{2m_\alpha}{E_\alpha}}\right)$$

$$\ln t_{1/2} = A + \frac{B}{\sqrt{E_\alpha}}$$

Билет 13 = 11 2

1. Операторы физических величин. Собственные функции и собственные значения операторов импульса и координаты для свободной частицы. Проблема одновременного измерения физических величин. И1(111-118)

2. Модель газа свободных электронов в металле. Энергия Ферми. Средняя энергия газа свободных электронов. Электронная теплоемкость металла. И2(103-108, 123-124)

Операторы. Оператором называют символическое обозначение математической операции, которую необходимо совершить с интересующей нас функцией. Примером оператора могут служить умножение на x или на какую-либо функцию $f(x)$, дифференцирование по x , т. е. $\partial/\partial x$, $\partial^2/\partial x^2$ и т. д. Операторы принято обозначать буквами со «шляпкой», например \hat{Q} , и его действие на некоторую функцию $f(x)$ записывают как $\hat{Q}f(x)$.

Некоторые свойства операторов. Операторы можно складывать: $\hat{A} + \hat{B}$. Действие такого суммарного оператора на любую функцию $f(x)$ дает результат $\hat{A}f(x) + \hat{B}f(x)$.

Под произведением операторов $\hat{A}\hat{B}$ понимают оператор, результат действия которого на любую функцию $f(x)$ равен $\hat{A}(\hat{B}f(x))$. Т. е. функция $f(x)$ сначала подвергается действию оператора \hat{B} , а затем полученный результат — действию оператора \hat{A} .

Следует иметь в виду, что не всегда $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$. Если такое равенство соблюдается, то говорят, что операторы \hat{A} и \hat{B} коммутируют друг с другом (коммутирующие операторы). В противном случае операторы некоммутирующие. Пример некоммутирующих операторов — это x и $\partial/\partial x$. В самом деле,

$$\left(x \frac{\partial}{\partial x}\right)f = x \frac{\partial f}{\partial x}, \quad \left(\frac{\partial}{\partial x} x\right)f = \frac{\partial}{\partial x}(xf) = 1 + x \frac{\partial f}{\partial x}. \quad x \frac{\partial}{\partial x} \neq \frac{\partial}{\partial x} x.$$

Оператор A называют *линейным*, если для любых двух функций f_1 и f_2 и любых постоянных α_1 и α_2 выполняется соотношение

$$\hat{A}(\alpha_1 f_1 + \alpha_2 f_2) = \alpha_1 \hat{A} f_1 + \alpha_2 \hat{A} f_2.$$

Общее утверждение квантовой теории заключается в том, что *среднее значение любой физической величины Q находится по формуле*

$$\langle Q \rangle = \int \psi^* \hat{Q} \psi dx, \quad (5.5)$$

где \hat{Q} — оператор физической величины Q .

Сопоставив (5.5) с (5.4), приходим к выводу, что операторами величин x и p_x являются

$$\hat{x} = x, \quad \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (5.6)$$

Аналогично для операторов \hat{y} , \hat{z} , \hat{p}_y , \hat{p}_z .

Операторы \hat{x} и \hat{p}_x являются основными в квантовой теории.

Свободные электроны в металле. Электропроводность металлов обусловлена, как известно, наличием в них электронов, которые мы называем *свободными*. Они не связаны с конкретными атомами и могут практически свободно перемещаться в пределах образца. В первом приближении свободные электроны можно рассматривать как идеальный газ из фермионов в прямоугольной потенциальной яме.

Энергия Ферми. В рассматриваемом случае ($T = 0$) величину μ называют *энергией* или *уровнем Ферми*: $\epsilon_F = \mu$. Эта энергия является максимальной, которую могут иметь свободные электроны в металле при $T = 0$. Найдем ϵ_F .

Оценим значение ϵ_F . Концентрация n свободных электронов в металлах находится в пределах от 10^{22} до 10^{23} см⁻³. Для среднего значения $n = 5 \cdot 10^{22}$ получим

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{8m} \left(\frac{3n}{\pi} \right)^{2/3},$$

$$\epsilon_F = 0,8 \cdot 10^{-11} \text{ эрг} = 5 \text{ эВ.}$$

Средняя энергия свободных электронов. При $T = 0$ имеем следующее выражение:

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{1}{n} \int_0^{\epsilon_F} \epsilon dn_\epsilon = \frac{1}{n} \int_0^{\epsilon_F} 2 \alpha \epsilon^{3/2} d\epsilon = \frac{3}{5} \epsilon_F, \quad (4.16)$$

где использованы формулы (4.13) и (4.11). При значении $\epsilon_F = 5$ эВ $\langle \epsilon \rangle = 3$ эВ.

Теплоемкость кристалла. Зная $U(T)$, находим, что теплоемкость единицы объема кристалла

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{9n_0 \hbar^2}{kT^2 v_{\text{макс}}^3} \int_0^{v_{\text{макс}}} \frac{e^{hv/kT} v^4 dv}{(e^{hv/kT} - 1)^2}. \quad (4.49)$$

Введем так называемую *характеристическую температуру Дебая* Θ , определяемую условием

$$hv_{\text{макс}} = k\Theta, \quad (4.50)$$

а также новую переменную $x = hv/kT$. Тогда выражение для теплоемкости (4.49) примет вид

$$C = 9n_0 k \left(\frac{T}{\Theta} \right)^3 \int_0^{\Theta/T} \frac{e^x x^4 dx}{(e^x - 1)^2}, \quad (4.51)$$

где $x_m = hv_{\text{макс}}/kT = \Theta/T$. Выражение (4.51) называют *формулой Дебая*.

Поведение теплоемкости $C(T)$ в предельных случаях

1. При $T \ll \Theta$ можно приближенно считать, что верхний предел интеграла (4.51) $x_m \rightarrow \infty$. Тогда интеграл будет представлять собой некоторое число, и мы видим, что в этом случае

$$C \propto T^3. \quad (4.52)$$

Этот результат называют *законом T^3 Дебая*. Именно такую зависимость C от T и наблюдают во многих случаях, при $T \ll \Theta$.

2. При $T \gg \Theta$, т. е. при $hv_{\text{макс}}/kT \ll 1$, выражение (4.48) для U можно упростить, считая $e^{hv/kT} \approx 1 + hv/kT$. Тогда

$$U = \frac{9n_0 \hbar^2}{v_{\text{макс}}^3} \int_0^{v_{\text{макс}}} \frac{kT}{hv} v^3 dv = 3n_0 kT. \quad (4.53)$$

Для моля кристалла заменяем n_0 на N_A , и получим, что для молярной теплоемкости кристалла

$$C = 3R,$$

как и должно быть в соответствии с законом Дюлонга и Пти.

Роль электронного газа в теплоемкости кристалла. Расчет показывает, что при $T \neq 0$ средняя энергия свободного электрона в металле имеет вид

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{3}{5} \epsilon_F \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\epsilon_F} \right)^2 \right], \quad (4.54)$$

где ϵ_F — энергия Ферми при $T = 0$. Тогда молярная теплоемкость электронного газа

$$C_{\text{эл}} = N_A \frac{\partial \langle \epsilon \rangle}{\partial T} = \frac{\pi^2}{2} \frac{kT}{\epsilon_F} R. \quad (4.55)$$

По закону Дюлонга и Пти молярная теплоемкость решетки при нормальных условиях $C_{\text{реш}} = 3R$. Тогда отношение электронной теплоемкости к решеточной при нормальных условиях будет равно

$$\frac{C_{\text{эл}}}{C_{\text{реш}}} = \frac{\pi^2}{6} \frac{kT}{\epsilon_F}. \quad (4.56)$$

12.1 Операторы физических величин. Собственные функции и собственные значения оператора проекции момента импульса L_z . И1(120-122).

Проекция момента M_z . Поскольку в одном и том же состоянии проекции момента на два различных направления не могут иметь определенные значения, то избранное направление можно взять произвольно. Такое направление обычно принимают за ось Z , так как в этом случае оператор \hat{M}_z дается более простой формулой (5.12).

Таким образом, для определения собственных значений и собственных функций этого оператора надо, согласно (5.16), решить уравнение

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi = M_z \psi. \quad (5.22)$$

Подстановка $\psi = Ce^{i\alpha\varphi}$ приводит после сокращения на общий множитель $e^{i\alpha\varphi}$ к уравнению $-i\hbar\alpha = M_z$, из которого $\alpha = iM_z/\hbar$. Значит, решение уравнения (5.22) таково:

$$\psi = Ce^{im\varphi}, \quad m = M_z/\hbar. \quad (5.23)$$

Эта функция конечна, непрерывна и гладкая. Она должна быть и однозначной, для чего должно быть выполнено условие

$$\psi(\varphi + 2\pi) = \psi(\varphi).$$

Данное условие выполняется только при целых значениях m (5.23).

Следовательно, проекция углового момента на ось Z является кратной постоянной Планка:

$$M_z = m\hbar, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (5.24)$$

Поскольку ось Z выбирают произвольно, равенство (5.24) означает, что проекция углового момента на любое направление квантуется. Схематически это показано на рис. 5.2. Разумеется, подобные схемы не следует понимать буквально, ибо «вектор» \mathbf{M} принципиально не имеет определенных направлений в пространстве.

По причинам, которые выяснятся в дальнейшем (§ 7.1), число m называют *магнитным квантовым числом*.

С точки зрения квантовой теории волновая функция ψ , соответствующая определенному квантовому числу l , представляет собой суперпозицию состояний (ψ_{lm} -функций), отличающихся друг от друга квантовым числом m . Иначе говоря, состояние с заданным l является вырожденным по m , причем кратность вырождения, т. е. число различных значений m , как следует из (5.24), равно $2l + 1$. Как будет показано в дальнейшем (§ 7.2), вырождение снимается при помещении атома в магнитное поле.

Проекция вектора не может быть больше модуля этого вектора, т. е. $|M_z| \leq M$, поэтому в соответствии с (5.20) и (5.21) должно выполняться условие

$$|m| \leq \sqrt{l(l+1)}.$$

Отсюда следует, что максимальное значение $|m|$ равно l .

Мы видим, что при заданном l число m принимает $2l + 1$ значений:

$$l, l-1, \dots, 0, \dots, -(l-1), -l,$$

образующих спектр величины M_z . Заметим, что в квантовой теории при указании орбитального момента принято называть только l , поскольку оно задает как модуль углового момента, так и все возможные значения его проекций на ось Z . Так например, когда говорят, что орбитальный момент $l = 2$, то имеется в виду модуль M момента и спектр M_z :

$$M = \hbar\sqrt{6}, \quad M_z = 2\hbar, 1\hbar, 0, -1\hbar, -2\hbar.$$

Итак, мы имеем:

$$M = \hbar\sqrt{l(l+1)}, \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (5.25)$$

$$M_z = \hbar m, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l. \quad (5.26)$$

Полученные результаты, определяющие возможные значения M и M_z , называют *пространственным квантованием*. Для наглядности пространственное квантование обычно представляют графически (см. рис. 5.2).

Рассуждения, приведенные выше, можно провести и в обратном порядке: не от M к M_z , а наоборот. При этом можно использовать довольно поучительный прием, познакомиться с которым имеет определенный смысл.

Итак, найдем зависимость M от числа l . Для этого мысленно представим себе множество одинаковых частиц с одним и тем же моментом M , но с разными значениями его проекции M_z . Известно, что для средних значений справедливо равенство

$$\langle M^2 \rangle = \langle M_x^2 \rangle + \langle M_y^2 \rangle + \langle M_z^2 \rangle. \quad (5.27)$$

Левая часть этого равенства равна просто M^2 , а правая, в силу равновероятности всех проекций, может быть представлена как $3\langle M_z^2 \rangle$. Тогда (5.27) примет вид

$$M^2 = 3 \langle M_z^2 \rangle. \quad (5.28)$$

Далее, согласно (5.21) при всяком значении l проекция M_z может принимать $2l + 1$ различных значений. Поэтому среднее значение M_z^2 равно

$$\langle M_z^2 \rangle = \hbar^2 \langle m^2 \rangle = \hbar^2 \frac{\sum_{m=1}^l m^2}{2l+1}. \quad (5.29)$$

Из математики известно, что

$$\sum_{m=1}^l m^2 = \frac{l(l+1)(2l+1)}{6}.$$

Тогда формула (5.29) преобразуется к виду

$$\langle M_z^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{3} l(l+1). \quad (5.30)$$

И наконец, после подстановки (5.30) в (5.28) получим

$$M^2 = \hbar^2 l(l+1), \quad (5.31)$$

что и требовалось доказать.

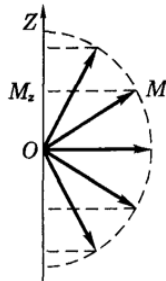


Рис. 5.2

12 2 Механизмы образования молекул. Типы химических связей (ковалентная, ионная, металлическая, Ван-дер-Ваальсова). Электронные, колебательные и вращательные уровни энергии молекул. Методы исследования молекулярных спектров: люминесценция, ИК поглощение, комбинационное рассеяние света. ГН(239-243), БКФ4(326-338).

Полная электронная энергия молекулы - это сумма кинетической энергии электронов, их средней потенциальной энергии, обусловленной притяжением к ядрам, которую представляет оператор остова H_c , и средней потенциальной энергии, обусловленной взаимным отталкиванием электронов. *полные электронные энергии молекул* представляют собой обычно величины порядка тысяч килокалорий

(>1,5

Механизм образования молекулы можно представить как образование молекулярных орбиталей вследствие энергетически наиболее выгодного перекрывания атомных орбиталей.

Ковалентная - бразованная перекрытием (обобществлением) пары валентных электронных облаков. ($H+H=H_2$)

Металлическая связь— связь между положительными ионами в кристаллах металлов, осуществляемая за счет притяжения электронов, свободно перемещающихся по кристаллу.

Ван-дер-Ваальсовая (ВВ) связь. Экспериментальным путем было определено, что молекулы, в которых внешние оболочки всех атомов заполнены, скажем, молекулы азота (N_2), хлора (Cl_2), аммиака (NH_3) и атомы инертных газов - He , Ne и т.д. также связываются друг с другом. Это слабые

Люминесценция - нетепловое свечение вещества, происходящее после поглощения им энергии возбуждения. ИК - раздел спектроскопии, изучающий взаимодействие инфракрасного излучения с веществами. При пропускании инфракрасного излучения через вещество происходит возбуждение колебательных движений молекул или их отдельных фрагментов. При этом наблюдается ослабление интенсивности света, прошедшего через образец.

Комбинационное - неупругое рассеяние оптического излучения на молекулах вещества (твёрдого, жидкого или газообразного), сопровождающееся заметным изменением частоты излучения. В отличие от рэлеевского рассеяния, в случае комбинационного рассеяния света в спектре рассеянного излучения появляются спектральные линии, которых нет в спектре первичного (возбуждающего) света. Число и расположение появившихся линий определяется молекулярным строением вещества. $E = E_{эл} + E_{кол} + E_{вр}$. Частицы в молекуле сильно различаются по массам. Поэтому движения ядер (колебательное, вращательное) в молекуле много медленнее по сравнению с движением электронов. Это обуславливает различный порядок величин энергий движения.

Энергия ван-дер-ваальсовского газа. Внутренняя энергия такого газа $U = \bar{K} + U_{вз}$, где \bar{K} — суммарная кинетическая энергия молекул в Ц-системе (связанной с сосудом), $U_{вз}$ — суммарная энергия взаимодействий молекул (собственная потенциальная энергия). Сначала найдем $U_{вз}$. Для этого воспользуемся тем, что работа сил притяжения равна убыли энергии $U_{вз}$: $dA = -dU_{вз}$. Силы притяжения характеризуются внутренним давлением $p_i = a/V_M^2$ в уравнении (1.42). Тогда элементарная работа этих сил $d'A = -p_i dV_M$, где знак минус обусловлен тем, что при расширении газа ($dV_M > 0$) работа $d'A$ должна быть отрицательной, т.е. $d'A < 0$. Итак,

$$d'A = -\frac{a}{V_M^2} dV_M = -d\left(-\frac{a}{V_M}\right).$$

Мы представили $d'A$ как убыль некоторой величины — она и является энергией $U_{вз}$:

$$U_{вз} = -a/V_M. \quad (1.43)$$

Константа, которую здесь следовало бы добавить, несущественна. Поэтому мы сразу же положили ее равной нулю. Получается естественный результат: при $V_M \rightarrow \infty$ $U_{вз} \rightarrow 0$.

Суммарная же кинетическая энергия \bar{K} зависит от поступательного и внутреннего движений молекул, и определяется как $C_V T$.

Таким образом, внутренняя энергия моля ван-дер-ваальсовского газа

$$U_M = C_V T - \frac{a}{V_M}, \quad (1.44)$$

где $C_V = (i/2)R$.

Билет 13

1. Операторы физических величин. Собственные функции и собственные значения операторов импульса и координаты для свободной частицы. Проблема одновременного измерения физических величин. И1(111-118)

2. Модель газа свободных электронов в металле. Энергия Ферми. Средняя энергия газа свободных электронов. Электронная теплоемкость металла. И2(103-108, 123-124)

Операторы. Оператором называют символическое обозначение математической операции, которую необходимо совершить с интересующей нас функцией. Примером оператора могут служить умножение на x или на какую-либо функцию $f(x)$, дифференцирование по x , т. е. $\partial/\partial x$, $\partial^2/\partial x^2$ и т. д. Операторы принято обозначать буквами со «шляпкой», например \hat{Q} , и его действие на некоторую функцию $f(x)$ записывают как $\hat{Q}f(x)$.

Некоторые свойства операторов. Операторы можно складывать: $\hat{A} + \hat{B}$. Действие такого суммарного оператора на любую функцию $f(x)$ дает результат $\hat{A}f(x) + \hat{B}f(x)$.

Под произведением операторов $\hat{A}\hat{B}$ понимают оператор, результат действия которого на любую функцию $f(x)$ равен $\hat{A}(\hat{B}f(x))$. Т. е. функция $f(x)$ сначала подвергается действию оператора \hat{B} , а затем полученный результат — действию оператора \hat{A} .

Следует иметь в виду, что не всегда $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$. Если такое равенство соблюдается, то говорят, что операторы \hat{A} и \hat{B} коммутируют друг с другом (коммутирующие операторы). В противном случае операторы некоммутирующие. Пример некоммутирующих операторов — это x и $\partial/\partial x$. В самом деле,

$$\left(x \frac{\partial}{\partial x}\right)f = x \frac{\partial f}{\partial x}, \quad \left(\frac{\partial}{\partial x} x\right)f = \frac{\partial}{\partial x}(xf) = 1 + x \frac{\partial f}{\partial x}. \quad x \frac{\partial}{\partial x} \neq \frac{\partial}{\partial x} x.$$

Оператор A называют *линейным*, если для любых двух функций f_1 и f_2 и любых постоянных α_1 и α_2 выполняется соотношение

$$\hat{A}(\alpha_1 f_1 + \alpha_2 f_2) = \alpha_1 \hat{A} f_1 + \alpha_2 \hat{A} f_2.$$

Общее утверждение квантовой теории заключается в том, что *среднее значение любой физической величины Q находится по формуле*

$$\langle Q \rangle = \int \psi^* \hat{Q} \psi dx, \quad (5.5)$$

где \hat{Q} — оператор физической величины Q .

Сопоставив (5.5) с (5.4), приходим к выводу, что операторами величин x и p_x являются

$$\hat{x} = x, \quad \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (5.6)$$

Аналогично для операторов \hat{y} , \hat{z} , \hat{p}_y , \hat{p}_z .

Операторы \hat{x} и \hat{p}_x являются основными в квантовой теории.

Свободные электроны в металле. Электропроводность металлов обусловлена, как известно, наличием в них электронов, которые мы называем *свободными*. Они не связаны с конкретными атомами и могут практически свободно перемещаться в пределах образца. В первом приближении свободные электроны можно рассматривать как идеальный газ из фермионов в прямоугольной потенциальной яме.

Энергия Ферми. В рассматриваемом случае ($T = 0$) величину μ называют *энергией* или *уровнем Ферми*: $\epsilon_F = \mu$. Эта энергия является максимальной, которую могут иметь свободные электроны в металле при $T = 0$. Найдем ϵ_F .

Оценим значение ϵ_F . Концентрация n свободных электронов в металлах находится в пределах от 10^{22} до 10^{23} см⁻³. Для среднего значения $n = 5 \cdot 10^{22}$ получим

$$\epsilon_F = 0,8 \cdot 10^{-11} \text{ эрг} = 5 \text{ эВ.}$$

Средняя энергия свободных электронов. При $T = 0$ имеем следующее выражение:

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{1}{n} \int_0^{\epsilon_F} \epsilon dn_\epsilon = \frac{1}{n} \int_0^{\epsilon_F} 2 \alpha \epsilon^{3/2} d\epsilon = \frac{3}{5} \epsilon_F, \quad (4.16)$$

где использованы формулы (4.13) и (4.11). При значении $\epsilon_F = 5$ эВ $\langle \epsilon \rangle = 3$ эВ.

Теплоемкость кристалла. Зная $U(T)$, находим, что теплоемкость единицы объема кристалла

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{9n_0 \hbar^2}{kT^2 v^3_{\text{макс}}} \int_0^{v_{\text{макс}}} \frac{e^{hv/kT} v^4 dv}{(e^{hv/kT} - 1)^2}. \quad (4.49)$$

Введем так называемую *характеристическую температуру Дебая* Θ , определяемую условием

$$hv_{\text{макс}} = k\Theta, \quad (4.50)$$

а также новую переменную $x = hv/kT$. Тогда выражение для теплоемкости (4.49) примет вид

$$C = 9n_0 k \left(\frac{T}{\Theta}\right)^3 \int_0^x \frac{e^x x^4 dx}{(e^x - 1)^2}, \quad (4.51)$$

где $x_m = hv_{\text{макс}}/kT = \Theta/T$. Выражение (4.51) называют *формулой Дебая*.

Поведение теплоемкости $C(T)$ в предельных случаях

1. При $T \ll \Theta$ можно приближенно считать, что верхний предел интеграла (4.51) $x_m \rightarrow \infty$. Тогда интеграл будет представлять собой некоторое число, и мы видим, что в этом случае

$$C \propto T^3. \quad (4.52)$$

Этот результат называют *законом T^3 Дебая*. Именно такую зависимость C от T и наблюдают во многих случаях, при $T \ll \Theta$.

2. При $T \gg \Theta$, т. е. при $hv_{\text{макс}}/kT \ll 1$, выражение (4.48) для U можно упростить, считая $e^{hv/kT} \approx 1 + hv/kT$. Тогда

$$U = \frac{9n_0 \hbar^2}{v^3_{\text{макс}}} \int_0^{v_{\text{макс}}} \frac{kT}{hv} v^3 dv = 3n_0 kT. \quad (4.53)$$

Для моля кристалла заменяем n_0 на N_A , и получим, что для молярной теплоемкости кристалла

$$C = 3R,$$

как и должно быть в соответствии с законом Дюлонга и Пти.

Роль электронного газа в теплоемкости кристалла. Расчет показывает, что при $T \neq 0$ средняя энергия свободного электрона в металле имеет вид

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{3}{5} \epsilon_F \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\epsilon_F} \right)^2 \right], \quad (4.54)$$

где ϵ_F — энергия Ферми при $T = 0$. Тогда молярная теплоемкость электронного газа

$$C_{\text{эл}} = N_A \frac{\partial \langle \epsilon \rangle}{\partial T} = \frac{\pi^2}{2} \frac{kT}{\epsilon_F} R. \quad (4.55)$$

По закону Дюлонга и Пти молярная теплоемкость решетки при нормальных условиях $C_{\text{реш}} = 3R$. Тогда отношение электронной теплоемкости к решеточной при нормальных условиях будет равно

$$\frac{C_{\text{эл}}}{C_{\text{реш}}} = \frac{\pi^2}{6} \frac{kT}{\epsilon_F}. \quad (4.56)$$

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{8m} \left(\frac{3n}{\pi} \right)^{2/3}$$

Билет 14

Порядки физических величин в квантовой физике. Принцип неопределенности. Проблема стабильности и размера атома водорода. Корпускулярно-волновой дуализм. Критерии применимости классического описания. БКФ4(62-84), И1(73-79). 2. Представления о квантовой теории излучения света атомами. Дипольное приближение. Вероятность перехода. Матричный элемент оператора дипольного момента. Понятие о правилах отбора. БКФ4(118-120, 136-142),

Соотношения неопределенностей. Глубокий анализ причин существования этого предела, который называют *принципом неопределенности*, провел В. Гейзенберг (1927). Количественные соотношения, выражающие этот принцип в конкретных случаях, называют *соотношениями неопределенностей*.

Наиболее важными являются два соотношения неопределенностей.

Первое из них ограничивает точности *одновременного* измерения координат и соответствующих проекций импульса частицы. Для проекции, например, на ось X оно выглядит так:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar, \quad (3.20)$$

Второе соотношение устанавливает неопределенность измерения энергии, ΔE , за данный промежуток времени Δt :

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar. \quad (3.21)$$

Оценим его размер и попытаемся понять, почему электрон не падает на ядро (как это можно объяснить с помощью соотношения неопределенностей).

Точное положение электрона в данном атоме запрещено принципом неопределенности: был бы бесконечно большой разброс в его импульсе. Поэтому для оценки наименьшей возможной энергии E_{\min} электрона в кулоновском поле ядра можно положить разброс расстояний электрона от ядра $\Delta r \approx r$ и $\Delta p \approx p$. Тогда согласно (3.20) $p \approx \hbar/r$, и энергия E может быть представлена как

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \approx \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r}. \quad (3.22)$$

Значение r , при котором $E = \min$, можно найти, приравняв производную dE/dr к нулю:

$$-\frac{\hbar^2}{mr^3} + \frac{e^2}{r^2} = 0.$$

Отсюда следует, что

$$r = \hbar^2/m_e^2. \quad (3.23)$$

Полученный результат полностью совпадает с боровским радиусом (2.23).

Подставив (3.23) в (3.22), мы найдем энергию E_{\min} :

$$E_{\min} = -\frac{e^2}{2r} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} = -13,6 \text{ эВ}, \quad (3.24)$$

что также совпадает с энергией основного состояния атома водорода (2.25).

Разумеется, совпадение наших грубых оценок с точными значениями r и E следует считать случайным. Важно лишь то, что получен верный порядок этих величин и что, основываясь на волновых представлениях, или принципе неопределенности, можно понять, почему атомный электрон не падает на ядро. Размер атома является результатом компромисса двух слагаемых энергии (3.22), имеющих противоположные знаки. Если увеличить отрицательное слагаемое (потенциальную энергию), уменьшив r , то увеличится кинетическая энергия, и наоборот.

Энергия покоя электрона

$$mc^2 = (0,511006 \pm 0,000002) \text{ МэВ}$$

Комптоновская длина волны электрона

$$\lambda_e = \hbar/mc = (3,86144 \pm 0,00003) \cdot 10^{-11} \text{ см}$$

Первый боровский радиус

$$a_0 = \hbar^2/me^2 = \alpha^{-1} \lambda_e = (5,29167 \pm 0,00002) \cdot 10^{-9} \text{ см}$$

Ионизационный потенциал водорода при бесконечно большой массе протона

$$R_\infty = \alpha^2 mc^2/2 = (13,6053 \pm 0,00013) \text{ эВ}$$

Постоянная Ридберга при бесконечно большой массе протона

$$\tilde{R}_\infty = \alpha/4\lambda a_0 = R_\infty/\hbar c = (109\,737,31 \pm 0,01) \text{ см}^{-1}$$

Постоянная Планка

$$h = 2\pi\hbar = (6,62559 \pm 0,00015) \cdot 10^{-27} \text{ эрг}\cdot\text{с}$$

$$\hbar = h/2\pi = (1,05449 \pm 0,00003) \cdot 10^{-27} \text{ эрг}\cdot\text{с}$$

Скорость света

$$c = (2,997925 \pm 0,000001) \cdot 10^{10} \text{ см/с}$$

Заряд электрона

$$e = (4,80298 \pm 0,00006) \cdot 10^{-10} \text{ СГСЭ} = (1,60210 \pm 0,00002) \cdot 10^{-19} \text{ Кл}$$

Масса электрона

$$m = (9,10908 \pm 0,00013) \cdot 10^{-28} \text{ г}$$

Масса протона

$$M_p = (1,67252 \pm 0,00003) \cdot 10^{-24} \text{ г}$$

Постоянная Авогадро

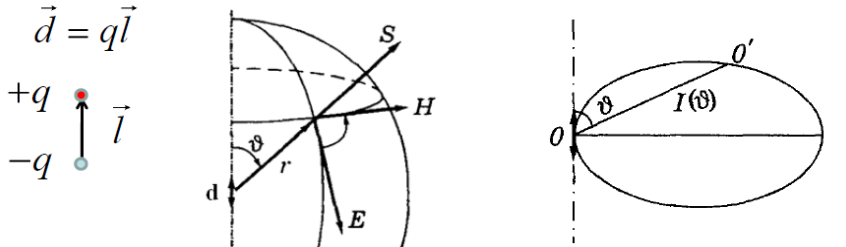
$$N_0 = (6,02252 \pm 0,00009) \cdot 10^{23} \text{ моль}^{-1}$$

Постоянная Больцмана

$$k = (1,38054 \pm 0,00006) \cdot 10^{-16} \text{ эрг/К}$$

Корпускулярно-волновой дуализм (или **Квантово-волновой дуализм**) — принцип, согласно которому любой физический объект может быть описан как с использованием математического аппарата, основанного на **волновых уравнениях**, так и с помощью формализма, основанного на представлении об объекте как о частице или как о системе частиц. В частности, волновое уравнение **Шрёдингера** не накладывает ограничений на массу описываемых им частиц, и следовательно, любой частице, как микро-, так и макро-, может быть поставлена в соответствие **волна де Бройля**. В этом смысле любой объект может проявлять как **волновые**, так и **корпускулярные** (квантовые) свойства^[1].

Классическая теория излучения



$\vec{d} = q\vec{l}$
 $E_m \propto H_m \propto \frac{1}{r} \sin \vartheta,$
 $I = \langle S \rangle \propto \frac{1}{r^2} \sin^2 \vartheta.$
 $d \sim l \sim \cos \omega t$

Энергия, излучаемая в единицу времени по всем направлениям

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2\ddot{d}^2}{3c^3} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2\omega^4}{3c^3} d^2$$

Квантовая теория излучения

Принцип соответствия

Энергия, излучаемая в единицу времени

$$\hbar\omega P_\omega \rightarrow \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2\omega^4}{3c^3} d^2 \quad \text{где}$$

$$P_\omega \rightarrow \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2\omega^3}{3\hbar c^3} d^2 \quad \text{Вероятность испускания фотона в единицу времени}$$

Вероятность перехода с уровня i на j

$$P_{ij} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2\omega^3}{3\hbar c^3} d_{ij}^2 \quad d_{ij} - \text{матричный элемент}$$

Правила отбора для электрических дипольных переходов

$$\Delta l = \pm 1 \quad \Delta m = 0, \pm 1$$

Правила отбора по m

Для атома водорода

$$d_{fi} = \left| \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi_f^*(r, \theta, \varphi) \mathbf{r} \psi_i(r, \theta, \varphi) r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi \right|$$

$$\mathbf{I} = \int_0^{2\pi} \Phi_f^*(\varphi) \mathbf{r} \Phi_i(\varphi) d\varphi \quad I_x = r \sin \theta \int_0^{2\pi} \cos \varphi e^{i(m_i - m_f)\varphi} d\varphi \quad I_y = r \sin \theta \int_0^{2\pi} \sin \varphi e^{i(m_i - m_f)\varphi} d\varphi$$

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \varphi \\ y &= r \sin \theta \sin \varphi \\ z &= r \cos \theta \end{aligned}$$

$$I_z = r \cos \theta \int_0^{2\pi} e^{i(m_i - m_f)\varphi} d\varphi \quad \Delta m = 0$$

$$I_x = \int_0^{2\pi} \Phi_f^*(\varphi) x \Phi_i(\varphi) d\varphi \quad I_x = \frac{1}{2} r \sin \theta \int_0^{2\pi} [e^{i(m_i - m_f - 1)\varphi} + e^{i(m_i - m_f + 1)\varphi}] d\varphi \quad \Delta m = \pm 1$$

$$I_y = \int_0^{2\pi} \Phi_f^*(\varphi) y \Phi_i(\varphi) d\varphi$$

$$I_z = \int_0^{2\pi} \Phi_f^*(\varphi) z \Phi_i(\varphi) d\varphi$$

Билет №15

Уравнение Шредингера. Волновая функция, ее свойства. Плотность вероятности. Стационарные и нестационарные состояния. И1(87-90), БКФ4(309-315).

http://genphys.phys.msu.ru/rus/edu/kvant/II_2_new/ShredingerEq.pdf 2. Механизмы образования молекул. Типы химических связей (ковалентная, ионная, металлическая, Ван-дер-Ваальсова). Электронные, колебательные и вращательные уровни энергии молекул. Методы исследования молекулярных спектров: люминесценция, ИК поглощение, комбинационное рассеяние света. ГН(239-243), БКФ4(326-338).

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi = E\psi.$$

Это уравнение называют *уравнением Шредингера для стационарных состояний*. В отличие от него, (4.5) называют *временным* или *общим уравнением Шредингера*.

Стационарные состояния. Особую роль в квантовой теории играют стационарные состояния — состояния, в которых все наблюдаемые физические величины не меняются с течением времени. Сама Ψ -функция, как уже говорилось, принципиально ненаблюдаема. В стационарных состояниях она имеет вид

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-i\omega t}, \quad \omega = E/\hbar, \quad (4.6)$$

Волновая функция (или вектор состояния) — комплексная функция, описывающая состояние квантовомеханической системы.

Физический смысл волновой функции. Величина $|\Psi(x, y, z, t)|^2 dV$ пропорциональна вероятности того, что частица будет обнаружена в момент времени t в объеме dV в окрестности точки (x, y, z) .

Ковалентная связь — наиболее общий вид химической связи, возникающий за счет обобществления электронной пары посредством **обменного механизма**, когда каждый из взаимодействующих атомов поставляет по одному электрону, или по **донорно-акцепторному механизму**, если электронная пара передается в общее пользование одним атомом (донором) другому атому (акцептору)

Ионная связь — частный случай ковалентной, когда образовавшаяся электронная пара полностью принадлежит более электроотрицательному атому, становящемуся анионом. Основой для выделения этой связи в отдельный тип служит то обстоятельство, что соединения с такой связью можно описывать в электростатическом приближении, считая ионную связь обусловленной притяжением положительных и отрицательных ионов. Взаимодействие ионов противоположного знака не зависит от направления, а кулоновские силы не обладают свойством насыщенности. Поэтому каждый ион в ионном соединении притягивает такое число ионов противоположного знака, чтобы образовалась кристаллическая решетка ионного типа. В ионном кристалле нет молекул. Каждый ион окружен определенным числом ионов другого знака (координационное число иона).

Уравнение Шредингера имеет следующий вид:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U\Psi,$$

Металлическая связь возникает в результате частичной делокализации валентных электронов, которые достаточно свободно движутся в решетке металлов, электростатически взаимодействуя с положительно заряженными ионами. Силы связи не локализованы и не направлены, а делокализованные электроны обуславливают высокую тепло- и электропроводность

Ван-дер-ваальсова (межмолекулярная) связь – наиболее универсальный вид межмолекулярной связи, обусловлен **дисперсионными силами** (индуцированный диполь – индуцированный диполь), **индукционным** взаимодействием (постоянный диполь – индуцированный диполь) и **ориентационным** взаимодействием (постоянный диполь – постоянный диполь). Энергия ван-дер-ваальсовой связи меньше водородной и составляет 2–20 кДж·моль⁻¹.

Билет №16

1. Квантовые свойства электромагнитного излучения. Фотоны. Энергия и импульс фотона. [Регистрация одиночных фотонов](#). Опыт Боте. Эффект Комптона. И1(21-29). 2. Операторы физических величин. Собственные функции и собственные значения операторов импульса и координаты для свободной частицы. [Проблема одновременного измерения физических величин](#). И1(111-118)

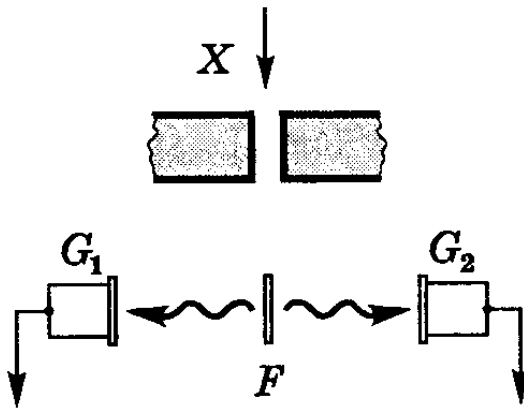


Рис. 1.9

опыте тонкую металлическую фольгу F устанавливали между двумя быстродействующими счетчиками G_1 и G_2 (рис. 1.9). Фольгу облучали *слабым* пучком рентгеновского излучения X , под действием которого она сама становилась источником рентгеновского излучения. Вследствие весьма слабой интенсивности первичного пучка количество квантов, испускаемых фольгой, было достаточно мало.

Если бы энергия этого излучения распространялась в виде сферических волн, то оба счетчика должны были бы срабатывать одновременно. Опыт, однако, показал, что счетчики реагировали совершенно независимо друг от друга, и число совпадений не превышало ожидаемого числа случайных совпадений. Все происходило так, как если бы излучение фольги F распро-

странялось в виде отдельных квантов, которые могли попадать либо в один, либо в другой счетчик.

Это можно объяснить лишь тем, что в отдельных актах испускания возникают кванты излучения, т.е. частицы, летящие то в одном, то в другом направлении. Конечно, была принята предосторожность от того, что в результате первичного облучения фольга испускала и электроны. Для исключения этого окна счетчиков имели такую толщину, чтобы они были способны поглотить эти электроны и исключить их влияние на результаты опыта.

Комптон обнаружил, что в рассеянном излучении, наряду с исходной длиной волны λ , появляется *смещенная линия* с длиной волны $\lambda' > \lambda$. Это получило название *комптоновского смещения*, а само явление — *эффекта Комптона*.

Таким образом, фотон как частица обладает энергией и импульсом. Записав импульс в векторной форме, получим окончательное для энергии и импульса фотона следующие выражения:

$$\varepsilon = \hbar\omega, \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}, \quad (1.13)$$

где \mathbf{k} — волновой вектор, модуль которого $k = 2\pi/\lambda$.

$$\lambda' - \lambda = \lambda_C(1 - \cos \theta),$$

Операторы. *Оператором* называют символическое обозначение математической операции, которую необходимо совершить с интересующей нас функцией. Примером оператора могут служить умножение на x или на какую-либо функцию $f(x)$, дифференцирование по x , т. е. $\partial/\partial x$, $\partial^2/\partial x^2$ и т. д. Операторы принято обозначать буквами со «шляпкой», например \hat{Q} , и его действие на некоторую функцию $f(x)$ записывают как $\hat{Q}f(x)$.

Некоторые свойства операторов. Операторы можно складывать: $\hat{A} + \hat{B}$. Действие такого суммарного оператора на любую функцию $f(x)$ дает результат $\hat{A}f(x) + \hat{B}f(x)$.

Под произведением операторов $\hat{A}\hat{B}$ понимают оператор, результат действия которого на любую функцию $f(x)$ равен $\hat{A}(\hat{B}f(x))$. Т. е. функция $f(x)$ сначала подвергается действию оператора \hat{B} , а затем полученный результат — действию оператора \hat{A} .

Следует иметь в виду, что не всегда $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$. Если такое равенство соблюдается, то говорят, что операторы \hat{A} и \hat{B} *коммутируют* друг с другом (*коммутирующие операторы*). В противном случае операторы некоммутирующие. Пример некоммутирующих операторов — это x и $\partial/\partial x$. В самом деле,

$$\left(x \frac{\partial}{\partial x}\right)f = x \frac{\partial f}{\partial x}, \quad \left(\frac{\partial}{\partial x} x\right)f = \frac{\partial}{\partial x}(xf) = 1 + x \frac{\partial f}{\partial x}. \quad x \frac{\partial}{\partial x} \neq \frac{\partial}{\partial x} x.$$

Оператор \hat{A} называют *линейным*, если для любых двух функций f_1 и f_2 и любых постоянных α_1 и α_2 выполняется соотношение

$$\hat{A}(\alpha_1 f_1 + \alpha_2 f_2) = \alpha_1 \hat{A} f_1 + \alpha_2 \hat{A} f_2.$$

Общее утверждение квантовой теории заключается в том, что *среднее значение любой физической величины Q находится по формуле*

$$\langle Q \rangle = \int \psi^* \hat{Q} \psi dx, \quad (5.5)$$

где \hat{Q} — оператор физической величины Q .

Сопоставив (5.5) с (5.4), приходим к выводу, что операторами величин x и p_x являются

$$\hat{x} = x, \quad \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (5.6)$$

Аналогично для операторов \hat{y} , \hat{z} , \hat{p}_y , \hat{p}_z .

Операторы \hat{x} и \hat{p}_x являются основными в квантовой теории.

Билет №17

1. Представления о квантовой теории излучения света атомами. Типы радиационных переходов. Коэффициенты Эйнштейна. [Термодинамическое равновесие вещества и излучения](#). Формула Планка. И2(157-162), ГН(214-218). 3 http://genphys.phys.msu.ru/rus/edu/kvant/II_2_new/QuantumElectronics.pdf 2. Операторы физических величин. Собственные функции и собственные значения операторов импульса и координаты для свободной частицы. [Проблема одновременного измерения физических величин](#). И1(111-118). http://genphys.phys.msu.ru/rus/edu/kvant/II_2_new/QuantumPrincipals.pdf

Для установления равновесия при произвольной интенсивности падающего излучения необходимы переходы, вероятность которых возрастала бы с увеличением интенсивности излучения, т.е. переходы, связанные с испусканием фотонов под действием излучения. Возникающее при таких переходах излучение было названо *вынужденным* или *индуцированным*. Это было весьма важное открытие, которое, увы, не сразу было оценено по достоинству.

Для упрощения дальнейших рассуждений рассмотрим два энергетических уровня атомов (молекул) среды, между которыми, по Эйнштейну, возможны три типа процессов: спонтанное излучение, поглощение и вынужденное (индуцированное) излучение (рис. 6.1). На рисунке они отмечены как *сп*, *погл* и *инд*. Далее будем считать (это не принципиально), что кратность вырождения этих уровней $g_1 = g_2 = 1$, т.е. уровни невырожденные.

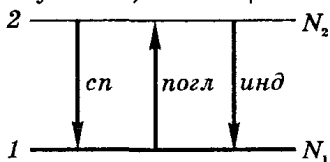


Рис. 6.1

Теперь введем «вероятности» переходов P , понимая под этим число переходов ежесекундно в расчете на один атом:

$$P_{21}^{\text{инд}} = B_{21}u_\nu, \quad P_{12}^{\text{погл}} = B_{12}u_\nu, \quad (6.1)$$

где B_{21} и B_{12} — так называемые *коэффициенты Эйнштейна*, u_ν — спектральная плотность энергии излучения, соответствующая энергии $h\nu$ перехода между данными уровнями.

Исходя из термодинамических соображений, Эйнштейн установил, что $P_{21}^{\text{инд}} = P_{12}^{\text{погл}}$. Это значит, что коэффициенты

$$B_{21} = B_{12}. \quad (6.2)$$

Формула планка - выражение для **спектральной плотности мощности излучения** (спектральной плотности энергетической светимости) **абсолютно чёрного тела**, которое было получено **Максом Планком** для плотности энергии излучения

$$u(\omega, T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar \omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1}$$

$$\frac{W_{2 \rightarrow 1}^{\text{вын}}}{W_{2 \rightarrow 1}^{\text{сп}}} = \frac{1}{\exp(\hbar \omega / kT) - 1} = \frac{\pi c^3}{2 \hbar \omega^3} u_\nu \cdot B_{2 \rightarrow 1} = \frac{2 \hbar \omega^3}{\pi c^3} B_{2 \rightarrow 1}.$$

Операторы. *Оператором* называют символическое обозначение математической операции, которую необходимо совершить с интересующей нас функцией. Примером оператора могут служить умножение на x или на какую-либо функцию $f(x)$, дифференцирование по x , т. е. $\partial/\partial x$, $\partial^2/\partial x^2$ и т. д. Операторы принято обозначать буквами со «шляпкой», например \hat{Q} , и его действие на некоторую функцию $f(x)$ записывают как $\hat{Q}f(x)$.

Некоторые свойства операторов. Операторы можно складывать: $\hat{A} + \hat{B}$. Действие такого суммарного оператора на любую функцию $f(x)$ дает результат $\hat{A}f(x) + \hat{B}f(x)$.

Под произведением операторов $\hat{A}\hat{B}$ понимают оператор, результат действия которого на любую функцию $f(x)$ равен $\hat{A}(\hat{B}f(x))$. Т. е. функция $f(x)$ сначала подвергается действию оператора \hat{B} , а затем полученный результат — действию оператора \hat{A} .

Следует иметь в виду, что не всегда $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$. Если такое равенство соблюдается, то говорят, что операторы \hat{A} и \hat{B} *коммутируют* друг с другом (*коммутирующие операторы*). В противном случае операторы некоммутирующие. Пример некоммутирующих операторов — это x и $\partial/\partial x$. В самом деле,

$$\left(x \frac{\partial}{\partial x}\right)f = x \frac{\partial f}{\partial x}, \quad \left(\frac{\partial}{\partial x} x\right)f = \frac{\partial}{\partial x}(xf) = 1 + x \frac{\partial f}{\partial x}. \quad x \frac{\partial}{\partial x} \neq \frac{\partial}{\partial x} x.$$

Оператор A называют *линейным*, если для любых двух функций f_1 и f_2 и любых постоянных α_1 и α_2 выполняется соотношение

$$\hat{A}(\alpha_1 f_1 + \alpha_2 f_2) = \alpha_1 \hat{A} f_1 + \alpha_2 \hat{A} f_2.$$

Общее утверждение квантовой теории заключается в том, что *среднее значение любой физической величины Q находится по формуле*

$$\langle Q \rangle = \int \psi^* \hat{Q} \psi dx, \quad (5.5)$$

где \hat{Q} — оператор физической величины Q .

Сопоставив (5.5) с (5.4), приходим к выводу, что операторами величин x и p_x являются

$$\hat{x} = x, \quad \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (5.6)$$

Аналогично для операторов \hat{y} , \hat{z} , \hat{p}_y , \hat{p}_z .

Операторы \hat{x} и \hat{p}_x являются основными в квантовой теории.

Билет №18

Принцип суперпозиции. Разложение произвольной волновой функции по собственным функциям эрмитового оператора. Физический смысл коэффициентов разложения. Ф8(129-135).

2. Уравнение Шредингера. Гармонический осциллятор. Уровни энергии и волновые функции стационарных состояний. Нулевая энергия. И1(96-99)

Уравнение Шредингера имеет следующий вид:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U\Psi,$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U\Psi = E\Psi.$$

Это уравнение называют *уравнением Шредингера для стационарных состояний*. В отличие от него, (4.5) называют *временным* или *общим уравнением Шредингера*.

Задача об уровнях энергии одномерного гармонического осциллятора является одной из наиболее важных задач о собственных значениях.

В квантовой теории понятие силы теряет смысл (см. сноску на стр. 85), поэтому квантовый гармонический осциллятор следует определить как поведение частицы массы m с потенциальной энергией $U(x)$ такой же, как у классического осциллятора, а именно

$$U = \kappa x^2/2, \quad (4.20)$$

где κ — постоянная. Графиком функции (4.20) является парабола (рис. 4.6). Согласно классической механике осциллятор совершает гармонические колебания с циклической частотой

$\omega = \sqrt{\kappa/m}$. В квантовой теории это равенство следует рассматривать просто как введение некоторой новой постоянной (и не более), однако, как будет видно в дальнейшем, это делается неспроста. Сейчас же, выразив в формуле (4.20) κ через ω и m , получим

$$U = \frac{m\omega^2}{2} x^2. \quad (4.21)$$

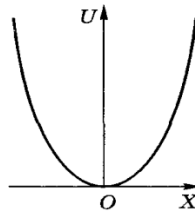


Рис. 4.6

Теперь обратимся к уравнению Шредингера (4.9), которое в нашем одномерном случае будет иметь вид

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) \Psi = 0. \quad (4.22)$$

Нахождение решения этого уравнения, т. е. ψ -функции, является громоздкой математической задачей. Для нас главное не в этом. Оказывается, уравнение (4.22) имеет конечные, однозначные, непрерывные и гладкие решения (собственные функции) при собственных значениях E , равных

$$E_v = \left(v + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega, \quad v = 0, 1, 2, \dots \quad (4.23)$$

Схема соответствующих энергетических уровней (4.23) дана на рис. 4.7. Видно, что эти уровни — эквидистантны, т. е. отстоят друг от друга на одинаковую величину. Минимальная энергия $E_0 = \hbar \omega/2$, ее называют *нулевой энергией*.

То, что минимальная энергия квантового осциллятора не равна нулю (частица не может «лежать» в нижней точке параболической потенциальной ямы), связано с принципом неопределенности, как и в случае прямоугольной ямы. Если бы энергия частицы была равна нулю, то частица покоилась бы, и ее импульс и координаты имели бы одновременно определенные значения, что противоречит принципу неопределенности.

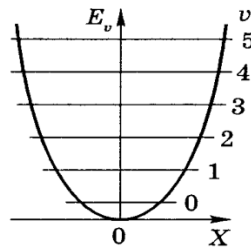


Рис. 4.7

Наличие нулевой энергии подтверждается экспериментально.

Более детальный расчет, выходящий за рамки уравнения Шредингера, показывает, что для квантового осциллятора возможны переходы лишь между *соседними* «стационарными» уровнями, при которых квантовое число v изменяется на единицу:

$$\Delta v = \pm 1. \quad (4.24)$$

Это условие называют *правилом отбора* для квантового гармонического осциллятора.

Билет №19

Операторы физических величин. Собственные значения и собственные функции операторов. Среднее значение и дисперсия физической величины. И1(111-118).

2. Модель газа свободных электронов в металле. Энергия Ферми. Средняя энергия газа свободных электронов. Электронная теплоемкость металла. И2(103-108, 123-124)

Операторы. *Оператором* называют символическое обозначение математической операции, которую необходимо совершить с интересующей нас функцией. Примером оператора могут служить умножение на x или на какую-либо функцию $f(x)$, дифференцирование по x , т. е. $\partial/\partial x$, $\partial^2/\partial x^2$ и т. д. Операторы принято обозначать буквами со «шляпкой», например \hat{Q} , и его действие на некоторую функцию $f(x)$ записывают как $\hat{Q}f(x)$.

Некоторые свойства операторов. Операторы можно складывать: $\hat{A} + \hat{B}$. Действие такого суммарного оператора на любую функцию $f(x)$ дает результат $\hat{A}f(x) + \hat{B}f(x)$.

Под произведением операторов $\hat{A}\hat{B}$ понимают оператор, результат действия которого на любую функцию $f(x)$ равен $\hat{A}(\hat{B}f(x))$. Т. е. функция $f(x)$ сначала подвергается действию оператора \hat{B} , а затем полученный результат — действию оператора \hat{A} .

Следует иметь в виду, что не всегда $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$. Если такое равенство соблюдается, то говорят, что операторы \hat{A} и \hat{B} *коммутируют* друг с другом (*коммутирующие операторы*). В противном случае операторы некоммутирующие. Пример некоммутирующих операторов — это x и $\partial/\partial x$. В самом деле,

$$\left(x \frac{\partial}{\partial x}\right)f = x \frac{\partial f}{\partial x}, \quad \left(\frac{\partial}{\partial x} x\right)f = \frac{\partial}{\partial x}(xf) = 1 + x \frac{\partial f}{\partial x} \neq \frac{\partial}{\partial x} x f.$$

Оператор \hat{A} называют *линейным*, если для любых двух функций f_1 и f_2 и любых постоянных α_1 и α_2 выполняется соотношение

$$\hat{A}(\alpha_1 f_1 + \alpha_2 f_2) = \alpha_1 \hat{A} f_1 + \alpha_2 \hat{A} f_2.$$

Средние значения физических величин. Понятие среднего значения различных физических величин является весьма важным в квантовой теории. Рассмотрим этот вопрос на конкретном примере — определим среднее значение координаты x частицы, если известна ее ψ -функция, которую мы ради простоты будем считать функцией только одной пространственной координаты x .

Мы уже знаем, что $|\psi(x)|^2$ или $\psi(x)\psi^*(x)$ является плотностью вероятности найти частицу в окрестности координаты x . Тогда вероятность местонахождения частицы в интервале $(x, x + dx)$ есть $dP = \psi\psi^* dx$, и среднее значение x определяется как

$$\langle x \rangle = \int x \psi \psi^* dx, \quad (5.1)$$

где интегрирование проводится по интересующей нас области. При этом предполагается, что ψ -функция является нормированной в (5.1), т. е. удовлетворяет условию (4.3):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi \psi^* dx = 1.$$

Свободные электроны в металле. Электропроводность металлов обусловлена, как известно, наличием в них электронов, которые мы называем *свободными*. Они не связаны с конкретными атомами и могут практически свободно перемещаться в пределах образца. В первом приближении свободные электроны можно рассматривать как идеальный газ из фермионов в прямоугольной потенциальной яме.

Энергия Ферми. В рассматриваемом случае ($T = 0$) величину μ называют *энергией* или *уровнем Ферми*: $\epsilon_F = \mu$. Эта энергия является максимальной, которую могут иметь свободные электроны в металле при $T = 0$. Найдем ϵ_F .

Средняя энергия свободных электронов. При $T = 0$ имеем следующее выражение:

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{1}{n} \int_0^{\epsilon_F} \epsilon dn_\epsilon = \frac{1}{n} \int_0^{\epsilon_F} 2\alpha \epsilon^{3/2} d\epsilon = \frac{3}{5} \epsilon_F, \quad (4.16)$$

где использованы формулы (4.13) и (4.11). При значении $\epsilon_F = 5$ эВ $\langle \epsilon \rangle = 3$ эВ.

Теплоемкость кристалла. Зная $U(T)$, находим, что теплоемкость единицы объема кристалла

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{9n_0 h^2}{kT^2 \nu_{\max}^3} \int_0^{\nu_{\max}} \frac{e^{h\nu/kT} \nu^4 d\nu}{(e^{h\nu/kT} - 1)^2}. \quad (4.49)$$

Введем так называемую *характеристическую температуру Дебая* Θ , определяемую условием

$$h\nu_{\max} = k\Theta, \quad (4.50)$$

а также новую переменную $x = h\nu/kT$. Тогда выражение для теплоемкости (4.49) примет вид

$$C = 9n_0 k \left(\frac{T}{\Theta} \right)^3 \int_0^{x_m} \frac{e^x x^4 dx}{(e^x - 1)^2}, \quad (4.51)$$

где $x_m = h\nu_{\max}/kT = \Theta/T$. Выражение (4.51) называют *формулой Дебая*.

Поведение теплоемкости $C(T)$ в предельных случаях

1. При $T \ll \Theta$ можно приближенно считать, что верхний предел интеграла (4.51) $x_m \rightarrow \infty$. Тогда интеграл будет представлять собой некоторое число, и мы видим, что в этом случае

$$C \propto T^3. \quad (4.52)$$

Этот результат называют *законом T^3 Дебая*. Именно такую зависимость C от T и наблюдают во многих случаях, при $T \ll \Theta$.

2. При $T \gg \Theta$, т.е. при $h\nu_{\max}/kT \ll 1$, выражение (4.48) для U можно упростить, считая $e^{h\nu/kT} \approx 1 + h\nu/kT$. Тогда

$$U = \frac{9n_0 h}{\nu_{\max}^3} \int_0^{\nu_{\max}} \frac{kT}{h\nu} \nu^3 d\nu = 3n_0 kT. \quad (4.53)$$

Для моля кристалла заменяем n_0 на N_A , и получим, что для молярной теплоемкости кристалла

$$C = 3R,$$

как и должно быть в соответствии с законом Дюлонга и Пти.

$$\epsilon_F = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{3n}{\pi} \right)^{2/3},$$

Оценим значение ϵ_F . Концентрация n свободных электронов в металлах находится в пределах от 10^{22} до 10^{23} см⁻³. Для среднего значения $n = 5 \cdot 10^{22}$ получим

$$\epsilon_F = 0,8 \cdot 10^{-11} \text{ эрг} = 5 \text{ эВ.}$$

Роль электронного газа в теплоемкости кристалла. Расчет показывает, что при $T \neq 0$ средняя энергия свободного электрона в металле имеет вид

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{3}{5} \epsilon_F \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\epsilon_F} \right)^2 \right], \quad (4.54)$$

где ϵ_F — энергия Ферми при $T = 0$. Тогда молярная теплоемкость электронного газа

$$C_{эл} = N_A \frac{\partial \langle \epsilon \rangle}{\partial T} = \frac{\pi^2}{2} \frac{kT}{\epsilon_F} R. \quad (4.55)$$

По закону Дюлонга и Пти молярная теплоемкость решетки при нормальных условиях $C_{реш} = 3R$. Тогда отношение электронной теплоемкости к решеточной при нормальных условиях будет равно

$$\frac{C_{эл}}{C_{реш}} = \frac{\pi^2 kT}{6 \epsilon_F}. \quad (4.56)$$

Билет №20

Фазовое пространство. Квантовые статистики частиц: Ферми-Дирака и Бозе-Эйнштейна. Плотность квантовых состояний. Распределения квантовых частиц по состояниям и их особенности для фермионов и бозонов. И2(99-103).

2. Волновые свойства частиц. Интерференция одиночных электронов (схема Юнга). Принцип суперпозиции состояний. И1(60-63, 69-71).

Различие статистик поясняет табл. 4.1, где показано как в каждой из них размещаются две тождественные частицы a и b по трем квантовым состояниям (клеткам).

Таблица 4.1

Статистика Больцмана		Статистика Бозе-Эйнштейна	Статистика Ферми-Дирака
a b \square	b a \square	\bullet \bullet \square	\bullet \bullet \square
\square a b	\square b a	\square \bullet \bullet	\square \bullet \bullet
a \square b	b \square a	\bullet \square \bullet	\bullet \square \bullet
ab \square \square	$\bullet\bullet$ \square \square	\square \square \square	\square \square \square
\square ab \square	\square $\bullet\bullet$ \square	\square \square $\bullet\bullet$	\square \square $\bullet\bullet$
\square \square ab	\square \square $\bullet\bullet$	\square \square $\bullet\bullet$	\square \square $\bullet\bullet$

Видно, что в статистике Больцмана всех микросостояний девять и вероятность каждого из них равна $1/9$.

В статистиках же Бозе-Эйнштейна и Ферми-Дирака состояния в первых трех парах распределения Больцмана *неразличимы*, и каждая пара рассматривается как *одно* состояние. Частицы a и b принципиально неразличимы, поэтому они обозначены просто точками. Для бозонов число микросостояний равно шести, и вероятность каждого из них $1/6$. Для фермионов последние три распределения статистики Бозе-Эйнштейна невозможны (*принцип Паули*). Остается только три микросостояния, и вероятность каждого из них равна $1/3$.

Квантовые распределения. Эти распределения представляют собой функции $f(\epsilon_i)$, определяющие средние числа частиц в одной фазовой ячейке с энергией ϵ_i , или функции заполнения ячеек:

$$\text{для фермионов} \quad f(\epsilon_i) = \frac{1}{e^{(\epsilon_i - \mu)/kT} + 1} \quad (4.2)$$

$$\text{для бозонов} \quad f(\epsilon_i) = \frac{1}{e^{(\epsilon_i - \mu)/kT} - 1} \quad (4.3)$$

1) частицы с полуцелым спином, их называют фермионами; они подчиняются статистике Ферми-Дирака;
2) частицы с целым спином — бозоны; они подчиняются статистике Бозе-Эйнштейна.

Во всех трех статистиках (классической, Бозе-Эйнштейна и Ферми-Дирака) допустимые микросостояния считаются *равновероятными*. Но различие их — в способах определения микросостояний. В статистике Ферми-Дирака в каждом квантовом состоянии может находиться не более одной частицы (*принцип Паули*), а в статистике Бозе-Эйнштейна — любое число частиц.

Итак, де-Бройль высказал гипотезу, что соотношение (1.12), относящееся к фотонам, имеет универсальный характер. Т. е. для всех частиц длина волны

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{p}. \quad (3.1)$$

Эта формула получила название *формулы де-Бройля*, а λ — *дебройлевской длины волны* частицы с импульсом p .

Де-Бройль также предположил, что пучок частиц, падающих на двойную щель, должен за ними интерферировать.

Вторым, независимым от формулы (3.1), соотношением является связь между энергией E частицы и частотой ω дебройлевской волны:

$$E = \hbar\omega. \quad (3.2)$$

С частотой ω и волновым числом k связаны две скорости — фазовая v_ϕ и групповая u :

$$v_\phi = \frac{\omega}{k} \quad \text{и} \quad u = \frac{\partial\omega}{\partial k}. \quad (3.3)$$

Из первой формулы (3.3) следует, что фазовая скорость дебройлевских волн

$$v_\phi = \frac{E}{\sqrt{2mE}} = \sqrt{\frac{E}{2m}} = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2m}}, \quad (3.6)$$

Опыты с одиночными электронами. Описанные выше опыты выполнялись с использованием пучков частиц. Поэтому возникает естественный вопрос: наблюдаемые волновые свойства выражают свойства пучка частиц или отдельных частиц?

Чтобы ответить на этот вопрос, В. Фабрикант, Л. Биберман и Н. Сушкин осуществили в 1949 г. опыты, в которых применялись столь слабые пучки электронов, что каждый электрон проходил через кристалл заведомо поодиночке и каждый рассеянный электрон регистрировался фотопластинкой. При этом оказалось, что отдельные электроны попадали в различные точки фотопластинки совершенно беспорядочным на первый взгляд образом (рис. 3.7, а). Между тем при достаточно длительной экспозиции на фотопластинке возникала дифракционная картина (рис. 3.7, б), абсолютно идентичная картине дифракции от обычного электронного пучка. Так было доказано, что волновыми свойствами обладают и отдельные частицы.

Таким образом, мы имеем дело с микрообъектами, которые обладают *одновременно* как корпускулярными, так и волновыми свойствами. Это позволяет нам в дальнейшем говорить об электронах, но выводы, к которым мы придем, имеют совершенно общий смысл и в равной степени применимы к любым частицам.

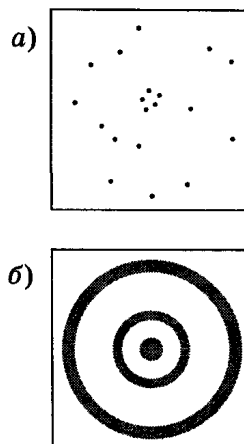


Рис. 3.7

Билет №21

Нестационарное уравнение Шредингера. Дифференцирование операторов по времени. Сохраняющиеся величины (интегралы движения). Матв.(122-123).

2. Корпускулярно - волновой дуализм. Опыт Тэйлора. Дифракция одиночных фотонов и электронов на щели. Соотношение неопределенности Гейзенберга для импульса и координаты. И1(60-63, 73-77)

Уравнение Шредингера имеет следующий вид:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U\Psi,$$

Итак, де-Бройль высказал гипотезу, что соотношение (1.12), относящееся к фотонам, имеет универсальный характер. Т. е. для всех частиц длина волны

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{p}. \quad (3.1)$$

Эта формула получила название *формулы де-Бройля*, а λ — *дебройлевской длины волны* частицы с импульсом p .

Де-Бройль также предположил, что пучок частиц, падающих на двойную щель, должен за ними интерферировать.

Вторым, независимым от формулы (3.1), соотношением является связь между энергией E частицы и частотой ω дебройлевской волны:

$$E = \hbar\omega. \quad (3.2)$$

С частотой ω и волновым числом k связаны две скорости — фазовая v_ϕ и групповая u :

$$v_\phi = \frac{\omega}{k} \quad \text{и} \quad u = \frac{\partial\omega}{\partial k}. \quad (3.3)$$

Из первой формулы (3.5) следует, что фазовая скорость дебройлевских волн

$$v_\phi = \frac{E}{\sqrt{2mE}} = \sqrt{\frac{E}{2m}} = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2m}}, \quad (3.6)$$

Опыты с одиночными электронами. Описанные выше опыты выполнялись с использованием пучков частиц. Поэтому возникает естественный вопрос: наблюдаемые волновые свойства выражают свойства пучка частиц или отдельных частиц?

Чтобы ответить на этот вопрос, В. Фабрикант, Л. Биберман и Н. Сушкин осуществили в 1949 г. опыты, в которых применялись столь слабые пучки электронов, что каждый электрон проходил через кристалл заведомо поодиночке и каждый рассеянный электрон регистрировался фотопластинкой. При этом оказалось, что отдельные электроны попадали в различные точки фотопластинки совершенно беспорядочным на первый взгляд образом (рис. 3.7, а). Между тем при достаточно длительной экспозиции на фотопластинке возникала дифракционная картина (рис. 3.7, б), абсолютно идентичная картине дифракции от обычного электронного пучка. Так было доказано, что волновыми свойствами обладают и отдельные частицы.

Таким образом, мы имеем дело с микрообъектами, которые обладают *одновременно* как корпускулярными, так и волновыми свойствами. Это позволяет нам в дальнейшем говорить об электронах, но выводы, к которым мы придем, имеют совершенно общий смысл и в равной степени применимы к любым частицам.

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar.$$

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar.$$

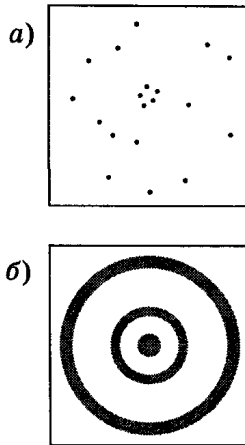


Рис. 3.7

Билет №22

Волновые свойства частиц. Гипотеза де Бройля. . Опыты Дэвиссона-Джермера и Томсона. И1(60-69).

2. Матричная формулировка квантовой механики. Векторное пространство физических состояний.

Обозначения Дирака. Координатное и импульсное представления. Ф8(129-135), БКФ4(213-217).

http://genphys.phys.msu.ru/rus/edu/kvant/II_2_new/QuantumPrincipals.pdf

Луи де-Бройль (1923) высказал и развил идею о том, что материальные частицы должны обладать и волновыми свойствами. К тому времени уже сложилась парадоксальная, но под-

Итак, де-Бройль высказал гипотезу, что соотношение (1.12), относящееся к фотонам, имеет универсальный характер. Т. е. для всех частиц длина волны

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{p}. \quad (3.1)$$

Эта формула получила название *формулы де-Бройля*, а λ — *дебройлевской длины волны* частицы с импульсом p .

Де-Бройль также предположил, что пучок частиц, падающих на двойную щель, должен за ними интерферировать.

Вторым, независимым от формулы (3.1), соотношением является связь между энергией E частицы и частотой ω дебройлевской волны:

$$E = \hbar\omega. \quad (3.2)$$

С частотой ω и волновым числом k связаны две скорости — фазовая v_ϕ и групповая u :

$$v_\phi = \frac{\omega}{k} \quad \text{и} \quad u = \frac{\partial\omega}{\partial k}. \quad (3.3)$$

Из первой формулы (3.5) следует, что фазовая скорость дебройлевских волн

$$v_\phi = \frac{E}{\sqrt{2mE}} = \sqrt{\frac{E}{2m}} = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2m}}, \quad (3.6)$$

Опыты Дэвиссона и Джермера (1927). Идея их опытов заключалась в следующем. Если пучок электронов обладает волновыми свойствами, то можно ожидать, даже не зная механизма отражения этих волн, что их отражение от кристалла будет иметь такой же интерференционный характер, как у рентгеновских лучей.

В одной серии опытов Дэвиссона и Джермера для обнаружения дифракционных максимумов (если таковые есть) измерялись ускоряющее напряжение электронов и одновременно положение детектора D (счетчика отраженных электронов). В опыте использовался монокристалл никеля (кубической системы), сошлифованный так, как показано на рис. 3.1.

Если его повернуть вокруг вертикальной оси в положение, соответствующее рисунку, то в этом положении сошлифованная поверхность покрыта правильными рядами атомов, перпендикулярными к плоскости падения (плоскости рисунка), расстояние между которыми $d = 0,215$ нм.

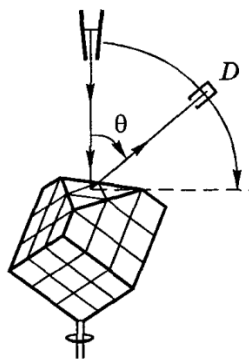


Рис. 3.1

Другая серия опытов Дэвиссона и Джермера состояла в измерении интенсивности I отраженного электронного пучка при заданном угле падения, но при различных значениях ускоряющего напряжения V .

опыт тейлора дифракция
одиночных электронов на щели

Обозначения Дирака

Состояние квантовой частицы может быть описано кет-вектором. Кет-векторы можно умножать на комплексные числа и складывать между собой, получая другие кет-векторы, т.е. кет-векторы образуют линейное пространство на поле комплексных чисел.

$$z_1|a\rangle + z_2|b\rangle = |c\rangle$$

Если кет-вектор, соответствующий некоторому состоянию, умножить на любое неравное нулю комплексное число, то полученный кет-вектор будет соответствовать тому же состоянию, т.е. **состояние определяется лишь направлением кет-вектора**, а длина, которую ему можно приписать, несущественна:

$$z_1|a\rangle + z_2|a\rangle = (z_1 + z_2)|a\rangle$$

Кет-вектору $|a\rangle$ можно сопоставить сопряженный ему бра-вектор $\langle a|$

Кет-вектор можно представить как вектор–столбец, координаты которого - комплексные числа. Тогда сопряженный ему бра-вектор будет вектор-строка, координаты которого равны комплексно-сопряженным координатам вектора кет, (для краткости будем считать, что размерность пространства равна двум):

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \quad \langle a| = (a_1^*, a_2^*) \quad \begin{array}{l} \text{Тогда норма вектора (квадрат длины)} \\ \text{будет определяться скалярным произведением:} \end{array}$$

$$\langle a|a\rangle = (a_1^* a_1 + a_2^* a_2) \geq 0 \quad (\text{действительное число})$$

Билет №23

Принцип суперпозиции. Разложение произвольной волновой функции по собственным функциям эрмитового оператора. Физический смысл коэффициентов разложения. Ф8(129-135).

2. Уравнение Шредингера. Гармонический осциллятор. Уровни энергии и волновые функции стационарных состояний. Нулевая энергия. И1(96-99)

Уравнение Шредингера имеет следующий вид:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U\Psi,$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U\Psi = E\Psi.$$

Это уравнение называют *уравнением Шредингера для стационарных состояний*. В отличие от него, (4.5) называют *временным* или *общим уравнением Шредингера*.

Задача об уровнях энергии одномерного гармонического осциллятора является одной из наиболее важных задач о собственных значениях.

В квантовой теории понятие силы теряет смысл (см. сноску на стр. 85), поэтому квантовый гармонический осциллятор следует определить как поведение частицы массы m с потенциальной энергией $U(x)$ такой же, как у классического осциллятора, а именно

$$U = \kappa x^2/2, \quad (4.20)$$

где κ — постоянная. Графиком функции (4.20) является парабола $\omega = \sqrt{\kappa/m}$. В квантовой теории это равенство следует рассматривать просто как введение некоторой новой постоянной (и не более), однако, как будет видно в дальнейшем, это делается неспроста. Сейчас же, выразив в формуле (4.20) κ через ω и m , получим

$$U = \frac{m\omega^2}{2} x^2. \quad (4.21)$$

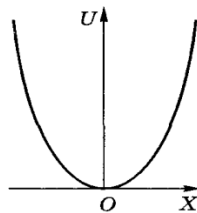


Рис. 4.6

Теперь обратимся к уравнению Шредингера (4.9), которое в нашем одномерном случае будет иметь вид

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) \Psi = 0. \quad (4.22)$$

Нахождение решения этого уравнения, т. е. ψ -функции, является громоздкой математической задачей. Для нас главное не в этом. Оказывается, уравнение (4.22) имеет конечные, однозначные, непрерывные и гладкие решения (собственные функции) при собственных значениях E , равных

$$E_v = \left(v + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega, \quad v = 0, 1, 2, \dots \quad (4.23)$$

Схема соответствующих энергетических уровней (4.23) дана на рис. 4.7. Видно, что эти уровни — эквидистантны, т. е. отстоят друг от друга на одинаковую величину. Минимальная энергия $E_0 = \hbar\omega/2$, ее называют *нулевой энергией*.

То, что минимальная энергия квантового осциллятора не равна нулю (частица не может «лежать» в нижней точке параболической потенциальной ямы), связано с принципом неопределенности, как и в случае прямоугольной ямы. Если бы энергия частицы была равна нулю, то частица покоилась бы, и ее импульс и координаты имели бы одновременно определенные значения, что противоречит принципу неопределенности.

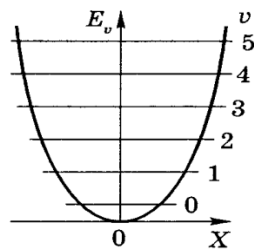


Рис. 4.7

Наличие нулевой энергии подтверждается экспериментально. Более детальный расчет, выходящий за рамки уравнения Шредингера, показывает, что для квантового осциллятора возможны переходы лишь между *соседними* «стационарными» уровнями, при которых квантовое число v изменяется на единицу:

$$\Delta v = \pm 1. \quad (4.24)$$

Это условие называют *правилом отбора* для квантового гармонического осциллятора.

Билет №24

Операторы физических величин. Собственные функции и собственные значения оператора. Принцип суперпозиции состояний. Проблема одновременного измерения физических величин. И1(111-118).

2. Резонансное усиление света. Получение инверсной заселенности с помощью трехуровневой схемы. Лазер. Характеристики излучения лазера. И2(157-162).

Операторы. *Оператором* называют символическое обозначение математической операции, которую необходимо совершить с интересующей нас функцией. Примером оператора могут служить умножение на x или на какую-либо функцию $f(x)$, дифференцирование по x , т. е. $\partial/\partial x$, $\partial^2/\partial x^2$ и т. д. Операторы принято обозначать буквами со «шляпкой», например \hat{Q} , и его действие на некоторую функцию $f(x)$ записывают как $\hat{Q}f(x)$.

Некоторые свойства операторов. Операторы можно складывать: $\hat{A} + \hat{B}$. Действие такого суммарного оператора на любую функцию $f(x)$ дает результат $\hat{A}f(x) + \hat{B}f(x)$.

Под произведением операторов $\hat{A}\hat{B}$ понимают оператор, результат действия которого на любую функцию $f(x)$ равен $\hat{A}(\hat{B}f(x))$. Т. е. функция $f(x)$ сначала подвергается действию оператора \hat{B} , а затем полученный результат — действию оператора \hat{A} .

Следует иметь в виду, что не всегда $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$. Если такое равенство соблюдается, то говорят, что операторы \hat{A} и \hat{B} *коммутируют* друг с другом (*коммутирующие операторы*). В противном случае операторы некоммутирующие. Пример некоммутирующих операторов — это x и $\partial/\partial x$. В самом деле,

$$\left(x \frac{\partial}{\partial x}\right)f = x \frac{\partial f}{\partial x}, \quad \left(\frac{\partial}{\partial x} x\right)f = \frac{\partial}{\partial x}(xf) = 1 + x \frac{\partial f}{\partial x} \neq \frac{\partial}{\partial x} x f.$$

Оператор \hat{A} называют *линейным*, если для любых двух функций f_1 и f_2 и любых постоянных α_1 и α_2 выполняется соотношение

$$\hat{A}(\alpha_1 f_1 + \alpha_2 f_2) = \alpha_1 \hat{A} f_1 + \alpha_2 \hat{A} f_2.$$

Средние значения физических величин. Понятие среднего значения различных физических величин является весьма важным в квантовой теории. Рассмотрим этот вопрос на конкретном примере — определим среднее значение координаты x частицы, если известна ее ψ -функция, которую мы ради простоты будем считать функцией только одной пространственной координаты x .

Мы уже знаем, что $|\psi(x)|^2$ или $\psi(x)\psi^*(x)$ является плотностью вероятности найти частицу в окрестности координаты x . Тогда вероятность местонахождения частицы в интервале $(x, x + dx)$ есть $dP = \psi\psi^* dx$, и среднее значение x определяется как

$$\langle x \rangle = \int x \psi \psi^* dx, \quad (5.1)$$

где интегрирование проводится по интересующей нас области. При этом предполагается, что ψ -функция является нормированной в (5.1), т. е. удовлетворяет условию (4.3):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi \psi^* dx = 1.$$

Вынужденное (индуцированное) излучение. Первоначально считалось, что между энергетическими уровнями атомов происходят два вида переходов: спонтанные (самопроизвольные) с более высоких на более низкие уровни и те, которые происходят под действием излучения (вынужденные) с более низких на более высокие уровни. Переходы первого рода приводят к спонтанному испусканию фотонов, переходы второго рода обуславливают поглощение излучения веществом.

Для установления равновесия при произвольной интенсивности падающего излучения необходимы переходы, вероятность которых возрастала бы с увеличением интенсивности излучения, т.е. переходы, связанные с испусканием фотонов под действием излучения. Возникающее при таких переходах излучение было названо *вынужденным* или *индуцированным*. Это было весьма важное открытие, которое, увы, не сразу было оценено по достоинству.

Для упрощения дальнейших рассуждений рассмотрим два энергетических уровня атомов (молекул) среды, между которыми, по Эйнштейну, возможны три типа процессов: спонтанное излучение, поглощение и вынужденное (индуцированное) излучение (рис. 6.1). На рисунке они отмечены как *сп*, *погл* и *инд*. Далее будем считать (это не принципиально), что кратность вырождения этих уровней $g_1 = g_2 = 1$, т.е. уровни невырожденные.

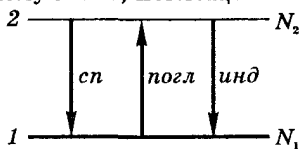


Рис. 6.1

Для упрощения дальнейших рассуждений рассмотрим два энергетических уровня атомов (молекул) среды, между которыми, по Эйнштейну, возможны три типа процессов: спонтанное излучение, поглощение и вынужденное (индуцированное) излучение (рис. 6.1). На рисунке они отмечены как *сп*, *погл* и *инд*. Далее будем считать (это не принципиально), что кратность вырождения этих уровней $g_1 = g_2 = 1$, т.е. уровни невырожденные.

Теперь введем «вероятности» переходов P , понимая под этим число переходов ежесекундно в расчете на один атом:

$$P_{21}^{\text{инд}} = B_{21}u_\nu, \quad P_{12}^{\text{погл}} = B_{12}u_\nu, \quad (6.1)$$

где B_{21} и B_{12} — так называемые *коэффициенты Эйнштейна*, u_ν — спектральная плотность энергии излучения, соответствующая энергии $h\nu$ перехода между данными уровнями.

Исходя из термодинамических соображений, Эйнштейн установил, что $P_{21}^{\text{инд}} = P_{12}^{\text{погл}}$. Это значит, что коэффициенты

А что, если среду сделать *активной* — чтобы число атомов на уровне 2 оказалось больше, чем на уровне 1? Тогда вклад в интенсивность за счет индуцированного излучения окажется больше, чем поглощение, коэффициент k' станет отрицательным и интенсивность пучка (6.6) усилится при прохождении *такой* среды. Ее называют *инверсной*. Эта мысль была высказана В. А. Фабрикантом (1940), но на нее не было обращено должного внимания. Создание инверсных систем казалось бесперспективным.

И все же открытие состоялось. В 1954 г. Н.Г. Басов и А.М. Прохоров и независимо от них Ч. Таунс, используя индуцированное излучение, создали квантовый генератор в микроволновом диапазоне, названный *мазером*. А в 1960 г. Мейман создал *лазер* — квантовый генератор в оптическом диапазоне (лазер на рубине). В дальнейшем началось стремительное совершенствование этих новых необычных источников света.

Особенности лазерного излучения. Это излучение обладает свойствами, которых нет ни у одного нелазерного источника. Оно отличается высокой степенью монохроматичности, направленности и когерентности. Так, в лучших газовых гелий-неоно-

вых лазерах расходимость пучка лучей достигает теоретического предела $\delta\theta \sim \lambda/D \sim 20$ угл. сек. Относительная ширина спектральной линии в излучении таких лазеров $\delta\nu/\nu \sim 10^{-11} \div 10^{-12}$. Кроме того, лазеры позволяют создавать излучения, интенсивности которых достигают огромных значений. Они соответствуют эффективной температуре, превышающей температуру Солнца в $10^{11} - 10^{12}$ раз!

В отличие от рубинового лазера, газовые лазеры могут работать не только в импульсном, но и в непрерывном режиме.

К настоящему времени разработано большое количество разнообразных лазеров, и трудно назвать области, где бы они не использовались. Но это требует особого разговора, выходящего за рамки нашей задачи — продемонстрировать идею создания резко неравновесных систем и возможности их использования.