

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ «МЭИ»
КАФЕДРА ФИЗИКИ ИМЕНИ В.А.ФАБРИКАНТА

С.В. ГРИГОРЬЕВ, Л.Г. ЛАПИНА, В.В. БЛИЗНЮК

СБОРНИК ЗАДАЧ ПО КУРСУ "СПЕЦИАЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ ФИЗИКИ"

для студентов, обучающихся по направлению
11.03.04 «Электроника и наноэлектроника»

Москва
Издательство МЭИ
2023

УДК
ББК
О

*Утверждено учебным управлением НИУ «МЭИ»
в качестве учебного пособия*

Подготовлено на кафедре физики им. В.А. Фабриканта

Рецензенты: А.А. Машиньян, проф. каф. физики им.В.А. Фабриканта
НИУ "МЭИ", докт. пед. наук;
С.В. Николаева, проф. каф. высшей математики и
программирования ФГБОУ ВО "МИРЭА" – Российский
технологический университет, докт. техн. наук.

Оптика

Сборник задач по курсу "Специальные вопросы физики" / С.В. Григорьев, Л.Г. Лапина, В.В. Близнюк. – М.: Издательство МЭИ, 2023. – 110с.

Сборник содержит задачи по курсу «Специальные вопросы физики» и включает задачи, посвящённые основам квантовой физики, физики микрочастиц, теории излучения, а также задачи по элементам статистической физики. Предназначен для студентов, обучающихся по направлению 11.03.04 «Электроника и наноэлектроника».

**УДК 535
ББК 22.34**

ISBN

© Национальный исследовательский
университет «МЭИ», 2023

ПРЕДИСЛОВИЕ

Тематика задач, включённых в данное пособие, соответствует курсу «Специальные вопросы физики», который читается студентам II курса Института радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова в плане подготовки бакалавров, обучающихся по направлению «Электроника и микроэлектроника».

В сборник включены задачи по квантовой механике и статистической физике, рекомендуемые для решения на семинарских занятиях по курсу «Специальные вопросы физики».

В пособии рассмотрены основные принципы квантовой механики; рассмотрены задачи, связанные с физикой атомов и молекул, квантовой теорией излучения, а также основами статистик, используемых в классической и квантовой физике.

Задачи разбиты на 9 разделов, отвечающих отдельным темам курса. Каждый раздел включает введение, в котором изложены основные сведения, необходимые для решения задач, формулировку самих задач, а также ответы и подробный разбор некоторых из них. В разделе 1 использованы материалы из сборника [2].

Известная сложность усвоения материала специального курса, а также громоздкость некоторых решений обуславливают тот факт, что число приведённых задач относительно невелико; однако, по мнению авторов, этого числа достаточно для проведения аудиторных занятий и самостоятельной работы студентов. Примерно половина задач подробно разобрана в конце каждого раздела, что должно значительно упростить работу как преподавателей, так и студентов.

В конце сборника представлен библиографический список учебных пособий для изучения разделов курса.

1. ВОЛНЫ ДЕ БРОЙЛЯ. СООТНОШЕНИЕ НЕОПРЕДЕЛЁННОСТЕЙ

1.1. Основные понятия и формулы

Луи де Бройль предположил, что волновые свойства присущи не только фотонам, которые имеют нулевую массу покоя, но и любым другим частицам – электронам, атомам и т.д. При этом длина волны λ , характеризующая эти свойства, связана с импульсом частицы той же формулой, что и для фотона:

$$\lambda = \frac{h}{p},$$

где h – постоянная Планка, p – импульс частицы.

Движению квантовой частицы (например, электрона) можно поставить в соответствие некоторый волновой процесс (волну де Бройля).

В частности, электрону с импульсом \vec{p} и энергией E соответствует плоская монохроматическая волна с волновым вектором \vec{k} и частотой ω :

$$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}, \quad \omega = \frac{E}{\hbar},$$

где $\hbar = \frac{h}{2\pi}$.

Для нерелятивистского электрона с массой покоя m_e энергия E определяется соотношением:

$$E = \frac{p^2}{2m_e};$$

Следовательно:

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m_e}, \quad \lambda = \frac{2\pi}{k}, \quad \lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}.$$

Волновая функция свободно движущейся вдоль оси x частицы с определённым импульсом (волна де Бройля) имеет вид плоской волны:

$$\Psi(x,t) \propto \exp\left(i\frac{px - Et}{\hbar}\right).$$

Соотношения неопределённостей – это фундаментальные соотношения квантовой механики, устанавливающие предел точности одновременного измерения канонически сопряжённых динамических

переменных, характеризующих квантовую систему. Соотношения неопределенностей есть следствие внутренних свойств квантовых объектов – корпускулярно-волнового дуализма.

Математически соотношения неопределённости записываются в виде следующих неравенств:

$$\Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta p_y \Delta y \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta p_z \Delta z \geq \frac{\hbar}{2},$$

где под неопределённостями координаты и импульса понимаются среднеквадратичные отклонения этих физических величин от их средних значений, т. е.

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle}.$$

Соотношение неопределённости для энергии и времени

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

можно трактовать как невозможность точного определения энергии за ограниченный интервал времени Δt вследствие взаимодействия системы с измерительным прибором.

Для возбуждённых квантовых систем неопределённость энергии состояния ΔE (естественная ширина уровня) непосредственно связана со временем τ жизни возбуждённого состояния соотношением неопределённости

$$\Delta E \tau \geq \frac{\hbar}{2}.$$

1.2. Задачи

1.1. Оценить с помощью соотношения неопределённости минимальную кинетическую энергию электрона, движущегося в области, размер которой около 0,1 нм.

1.2 Исходя из того, что радиус атома r имеет величину порядка 0,1 нм, оценить с помощью соотношения неопределённости скорость движущегося электрона в атоме водорода.

1.3. Возбуждённый атом испускает фотон в течение $\tau = 0,01$ мкс. Длина волны излучения $\lambda = 600$ нм. Найти, с какой точностью могут быть измерены энергия, длина волны и координата фотона.

1.4. Используя соотношения неопределённости, оценить минимальную амплитуду колебаний одномерного гармонического осциллятора массы m и частоты ω .

1.5. Исходя из соотношения неопределённостей, оценить энергию основного состояния атома водорода.

1.6. Найти длину волны де Бройля электрона, ускоренного в электрическом поле при разности потенциалов $U = 100$ В.

1.7. На две очень тонкие щели, расположенные друг от друга на расстоянии $d = 10$ мкм, падает пучок электронов с энергией $W = 1$ эВ. На расстоянии $L = 10$ м от щели находится экран. Каково расстояние между соседними максимумами интерференции на экране?

1.8. Параллельный пучок моноэнергетических электронов падает нормально на диафрагму с узкой прямоугольной щелью, ширина которой равна $b = 0,10$ мм. Найти скорость этих электронов, если известно, что на экране, отстоящем от щели на расстоянии $l = 50$ см, ширина центрального дифракционного максимума $\Delta x = 8,0$ мкм.

1.9. Доказать, что для атома водорода на боровских стационарных орбитах укладывается целое число длин волн де Бройля. Найти длины волн на первой и третьей орбитах.

1.10. Атом водорода ионизируется под действием ультрафиолетового излучения с длиной волны $\lambda = 75$ нм. Найти длину волны де Бройля высвободившегося электрона, если для ионизации атома водорода необходима энергия $\varepsilon_i = 13,6$ эВ.

1.3. Ответы и решения

1.1. $E_{k,\min} = \frac{\hbar^2}{2m_e l^2} \approx 3 \text{ эВ}.$

1.2. $v \approx 10^6 \text{ м/с}.$

1.3. Решение.

Найдём точность измерения координаты: $\Delta x = c \tau = 3 \text{ м}.$

Точность измерения энергии найдем из соотношения неопределённостей (предельный случай) $\Delta E \Delta t = \frac{\hbar}{2}$, где $\Delta t = \tau$, откуда получим

$$\Delta E \tau = \frac{\hbar}{2} \Rightarrow \Delta E = \frac{\hbar}{2\tau} = 0,33 \text{ эВ}.$$

Точность измерения длины волны найдем из формулы связи энергии фотона и длины волны:

$$E = \frac{hc}{\lambda} \Rightarrow \left| \frac{dE}{d\lambda} \right| = \left| -hc\lambda^{-2} \right| = \frac{hc}{\lambda^2}. \text{ При малых приращениях } \Delta E \text{ и } \Delta \lambda$$

можно считать

$$\frac{\Delta E}{\Delta \lambda} = \frac{dE}{d\lambda} = \frac{hc}{\lambda^2} \Rightarrow \Delta \lambda = \frac{\lambda^2 \Delta E}{hc} = \frac{\lambda^2 \hbar}{\hbar 2\pi 2\tau c} = \frac{\lambda^2}{4\pi \tau c} = 0,955 \cdot 10^{-14} \text{ м}.$$

$$\text{Определим соотношения } \frac{\Delta E}{E} = \frac{\Delta \lambda}{\lambda} = 1,6 \cdot 10^{-8}.$$

1.4. Решение.

Воспользуемся соотношением неопределённостей для координат и импульсов, рассмотрев случай

$$\Delta p_x \Delta x = \hbar.$$

Примем за неопределённость координаты

$$\Delta x = x.$$

Неопределённость импульса не может превышать величину самого импульса, т.е. в предельном случае

$$\Delta p = p.$$

Следовательно, из соотношения неопределённостей при выбранных допущениях получим

$$p = \frac{\hbar}{2x}.$$

Полная энергия осциллятора

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2} = \frac{\hbar^2}{x^2 2m} + \frac{kx^2}{2}.$$

Значение $A_{\min} = x_0$ найдём из условия $\frac{dE}{dx} = 0$:

$$\frac{dE}{dx} = \frac{\hbar^2}{2m} (-2x^{-3}) + \frac{2kx}{2} = 0 \Rightarrow \frac{\hbar^2}{mx^3} = kx \Rightarrow x_0 = \frac{\hbar^{1/2}}{(km)^{1/4}},$$

где $k = m\omega^2$.

Подставим $k = m\omega^2$ в выражение для x_0 :

$$x_0 = \frac{\hbar^{1/2}}{(km)^{1/4}} = \frac{\hbar^{1/2}}{(m^2\omega^2)^{1/4}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}; \quad x_0 = A_{\min} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}.$$

$$1.5. W_{\min} \approx -\frac{m_e e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2} = -13,5 \text{ эВ}.$$

$$1.6. \lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_e eU}} = 0,12 \text{ нм}.$$

$$1.7 \Delta x = \frac{hL}{d\sqrt{2mW}} = 1,2 \text{ мм}.$$

1.8. Решение.

Обозначим $\lambda_B = \lambda$, где λ_B – длина волны де Бройля.

Из условия первого минимума дифракционной картины (рис. 1.1)

$$b \sin \varphi = m \lambda_B,$$

где $m = 1$, получим

$$\sin \varphi = \frac{\lambda_B}{b}.$$

С учётом малости угла дифракции можно записать

$$\sin \varphi \approx \text{tg } \varphi.$$

Из геометрических соображений получим:

$$\text{tg } \varphi = \frac{\Delta x}{2l}.$$

Следовательно,

$$\frac{\lambda_B}{b} = \frac{\Delta x}{2l}.$$

Найдём длину волны де Бройля и подставим в полученное выражение:

$$\lambda_B = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_e v_e};$$

$$\frac{h}{bm_e v_e} = \frac{\Delta x}{2l} \Rightarrow v_e = \frac{2hl}{bm_e \Delta x} = 9 \cdot 10^5 \text{ м/с}.$$

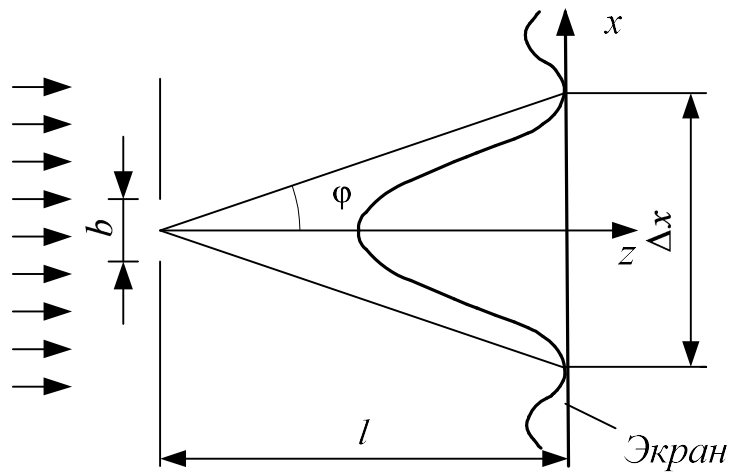


Рис.1.1. Распределение интенсивности в дифракционной картине при дифракции электронов на узкой щели

1.9. Решение.

Воспользуемся первым постулатом Бора:

$$L = m_e v_e r = n \hbar$$

или

$$p_e r = n \hbar ,$$

откуда

$$n = \frac{p_e r}{\hbar} ;$$

здесь n – целое число, $n = 1, 2, 3, \dots$.

Подставим в полученную формулу выражение для длины волны де Бройля $\lambda_B = \frac{h}{p}$:

$$n = \frac{h r}{\lambda_B \hbar} = \frac{2\pi \hbar r}{\lambda_B \hbar} = \frac{2\pi r}{\lambda_B} .$$

Как видим, на длине боровской орбиты укладывается целое число длин волн де Бройля.

Найдём далее длины волн де Бройля для электронов, находящихся на рассматриваемых орбитах.

Радиус орбиты определяется выражением $r = r_B = \frac{4\pi \epsilon_0 \hbar^2}{m_e} n^2$.

Для радиусов первой и третьей орбит получим

$$r_{B,1} = \frac{4\pi \epsilon_0 \hbar^2}{m_e} n_1^2 = 0,53 \text{ \AA} = 0,53 \cdot 10^{-10} \text{ м} ;$$

$$r_{B,3} = r_{B,1} \cdot 3^2.$$

Используя выражение для n , получим

$$n = \frac{2\pi r_B}{\lambda_B} \Rightarrow \lambda_B = \frac{2\pi r_B}{n}.$$

Следовательно, длины волн де Бройля для электронов, находящихся на рассматриваемых орбитах, равны

$$\lambda_{B,1} = \frac{2\pi r_{B,1}}{n_1} = 2\pi r_{B,1} = 0,332 \text{ нм};$$

$$\lambda_{B,3} = \frac{2\pi r_{B,1} n_2^2}{n_2} = 2\pi r_{B,1} n_2 = 0,996 \text{ нм}.$$

$$\mathbf{1.10.} \quad \lambda_B = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_e \left(\frac{hc}{\lambda} - \varepsilon_i \right)}} = 0,71 \text{ нм}.$$

2. МОДЕЛЬ БОРА ДЛЯ АТОМА ВОДОРОДА И ВОДОРОДОПОДОБНЫХ ИОНОВ

2.1. Основные понятия и формулы

В 1913 году Бор предложил свою теорию атома водорода. Положив в основу теории планетарную модель атома водорода, он сформулировал ряд постулатов, устраняющих противоречивость этой модели.

Постулаты Бора.

1. Двигаясь по стационарным орбитам, электрон не излучает электромагнитных волн.

2. Момент импульса электрона, движущегося по стационарным орбитам, принимает дискретные (квантованные) значения

$$L = m_e v_e r = n \hbar,$$

где m_e , v_e и r_n – масса, скорость и радиус n -й орбиты электрона соответственно; $\hbar = 1,055 \cdot 10^{-34}$ Дж·с – постоянная Планка, $n = 1, 2, 3, \dots$

3. При переходе электрона с одной стационарной орбиты на другую излучается или поглощается фотон. Энергия фотона

$$\hbar\omega = E_m - E_n,$$

где ω – круговая частота излучения, E_m и E_n – энергия электрона, находящегося на m -й и n -й стационарных орбитах. При переходе электрона из состояния с большей энергией в состояние с меньшей энергией происходит излучение фотона – кванта энергии. При переходе в состояние с большей энергией происходит поглощение фотона.

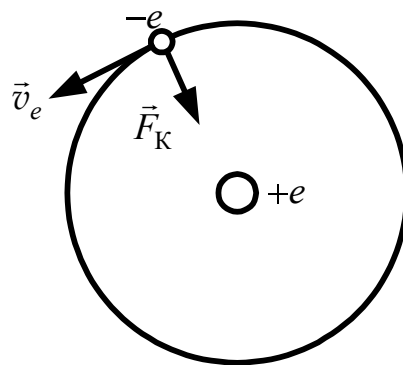


Рис. 2.1. Электрон на круговой орбите в атоме водорода

Второй закон Ньютона для электрона, вращающегося в соответствии с теорией Бора по круговой орбите вокруг ядра под действием кулоновской силы \vec{F}_K (рис. 2.1):

$$m_e \vec{a}_ц = \vec{F}_к$$

или

$$\frac{m_e v^2}{r_n} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_n^2}.$$

Следовательно, выражение для кинетической энергии можно также записать в виде

$$E_к = \frac{1}{2 \cdot 4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_n}.$$

Из выражения для второго постулата Бора $m_e v_e r = n\hbar$ и второго закона Ньютона для вращающегося по круговой орбите электрона можно найти выражение для радиуса боровской орбиты электрона:

$$r = r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 n^2}{m_e e^2}.$$

Потенциальная энергия U – это энергия взаимодействия электрона и положительного заряда ядра, равного заряду протона:

$$U = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_n}.$$

Полная энергия электрона E_n равна сумме его кинетической $E_к$ и потенциальной энергии U :

$$E_n = -\frac{1}{2 \cdot 4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_n}.$$

После подстановки радиуса боровской орбиты в выражение для полной энергии получим ещё одно выражение для полной энергии

$$E_n = -\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{m_e e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}.$$

Целое число n , определяющее дискретное значение энергии или энергетические уровни атома водорода, называется главным квантовым числом.

Состояние атома с главным квантовым числом $n = 1$ называется основным состоянием атома.

Схема энергетических уровней атома водорода представлена на рис. 2.2.

Энергия ионизации электрона в атоме водорода равна энергии связи электрона – величине, равной работе, которую нужно совершить для удаления электрона, находящегося в основном состоянии, из атома, без сообщения ему кинетической энергии. Для этого надо перевести электрон из основного состояния в состояние с энергией, равной нулю. Для

электрона в атоме водорода энергия связи равна энергии основного состояния, взятой со знаком "минус", т.е.

$$E_{\text{св,Н}} = |E_1| = +13,6 \text{ эВ.}$$

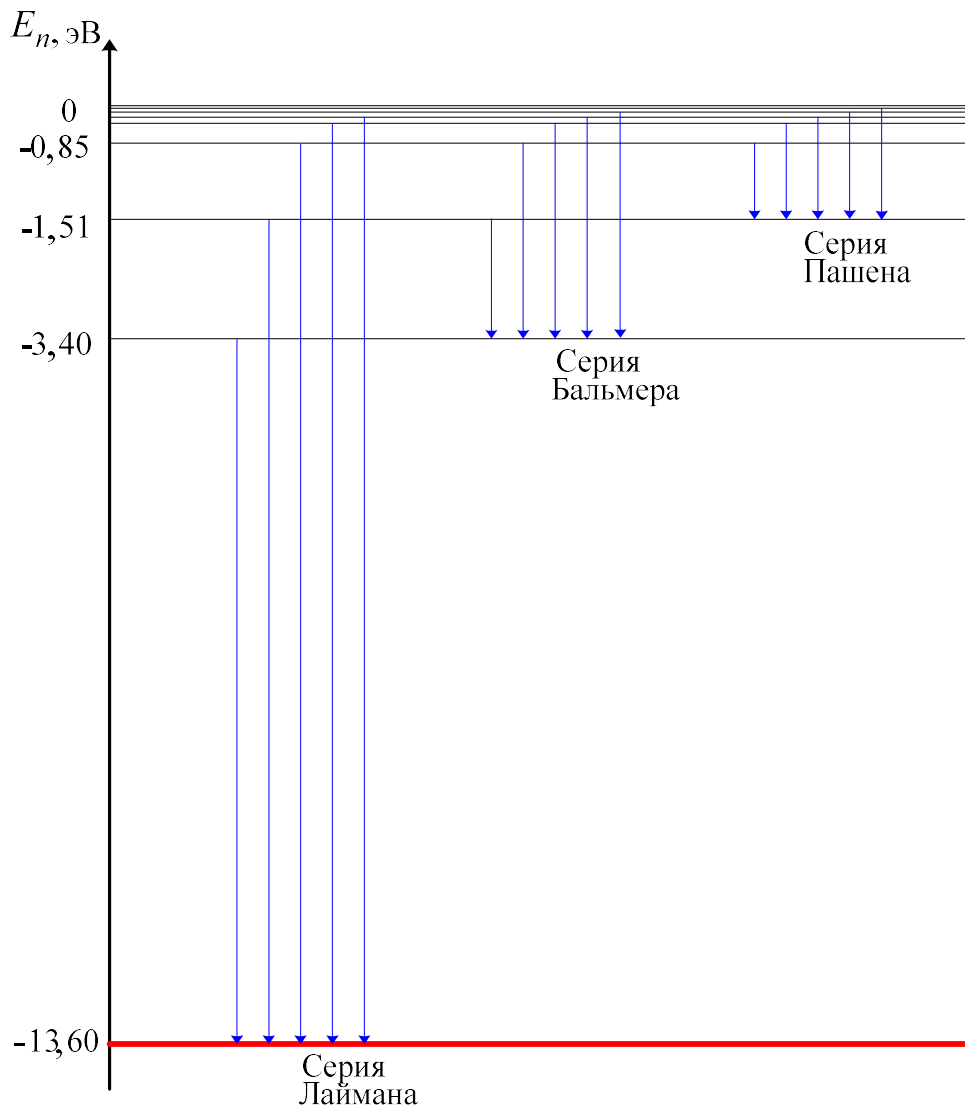


Рис. 2.2. Схема энергетических уровней атома водорода

Воспользовавшись третьим постулатом Бора и выражением для полной энергии электрона, для энергии излучаемого кванта получим

$$h\nu = E_m - E_n = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m_e e^4}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right).$$

Отсюда частота излучения равна:

$$\nu = \frac{m_e e^4}{64\pi^3 \epsilon_0^2 \hbar^3} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right).$$

Так как частота излучения ν и длина волны λ связаны соотношением $\nu = \frac{c}{\lambda}$, где c – скорость света в вакууме, то из последнего соотношения получим

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right),$$

где $R = \frac{m_e e^4}{64\pi^3 \hbar^3 \epsilon_0^2 c}$ – постоянная Ридберга ($R = 10973731 \text{ м}^{-1}$).

Из полученного выражения видно, что спектр излучения атома водорода является линейчатым.

Эта формула называется **серийной формулой**, так как длины волн спектра атома водорода образуют серии, характеризующиеся фиксированным значением n . Все длины волн данной серии излучаются при переходах на уровень E_n с вышележащих энергетических уровней E_m .

Переходы в основное состояние

$$E_2 \rightarrow E_1, E_3 \rightarrow E_1, E_4 \rightarrow E_1, \dots$$

образуют *серию Лаймана*. Для этой серии $n=1$, $m=2, 3, 4, \dots$. Линии серии Лаймана лежат в ультрафиолетовом диапазоне.

Переходы на второй уровень:

$$E_3 \rightarrow E_2, E_4 \rightarrow E_2, E_5 \rightarrow E_2, \dots$$

образуют *серию Бальмера*. Для этой серии $n=2$, $m=3, 4, 5, \dots$. Первые четыре линии серии Бальмера лежат в видимом диапазоне, остальные – в ультрафиолетовом.

Переходы на третий уровень

$$E_4 \rightarrow E_3, E_5 \rightarrow E_3, E_6 \rightarrow E_3, \dots$$

образуют *серию Пашена*. Для этой серии $m=4, 5, 6, \dots$. Все линии серии Пашена лежат в инфракрасном диапазоне.

В далекой инфракрасной области лежат линии *серии Брэккета* (переходы на уровень $n=4$), *серия Пфунда* (переходы на уровень $n=5$) и *серия Хэмфри* (переходы на уровень $n=6$).

При решении задач иногда удобно использовать следующее соотношение:

$$\frac{hc}{\lambda} = E_{\text{св,Н}} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right),$$

где $\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m_e e^4}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) = E_{\text{св,Н}}$ – энергия связи атома водорода.

Водородоподобные ионы.

Водородоподобные ионы – это ионы с одним электроном на орбите. Полная энергия электрона в таком ионе определяется формулой

$$E_{n,\text{под.Н}} = -\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{m_e e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} Z^2;$$

энергия связи – формулой

$$E_{\text{св, под.Н}} = E_{\text{св,Н}} \cdot Z^2;$$

длины волн излучения – из формулы

$$\frac{1}{\lambda} = RZ^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right),$$

где Z – порядковый номер химического элемента.

2.2. Задачи

2.1. Оценить время, за которое электрон, движущийся вокруг ядра в атоме водорода по орбите радиуса $r_0 = 0,5 \cdot 10^{-10}$ м, упал бы на ядро, если бы он терял энергию на излучение в соответствии с классической формулой $\frac{dE}{dt} = -\frac{2e^2}{12\pi\epsilon_0 c^3} |\vec{a}|^2$, где \vec{a} – ускорение электрона (считать ускорение \vec{a} все время направленным к центру).

2.2. В спектре некоторых водородоподобных ионов длина волны третьей линии серии Бальмера равна 108,5 нм. Найти энергию связи электрона в основном состоянии этих ионов.

2.3. Энергия связи электрона в атоме гелия равна $E_0 = 24,6$ эВ. Найти энергию, необходимую для удаления обоих электронов атома гелия.

2.4. Атом водорода, двигавшийся со скоростью $v_0 = 3,26$ м/с, испустил фотон, соответствующий переходу из первого возбуждённого состояния в основное. Найти угол θ между направлением вылета фотона и первоначального движения атома, если кинетическая энергия атома в результате излучения не изменилась.

2.5. Фотон, испущенный ионом гелия при переходе из первого возбужденного состояния в основное, ионизирует атом водорода, находящийся в основном состоянии. Найти скорость фотоэлектрона.

2.6. Считая ядро неподвижным, вычислить для атома водорода и ионов He^+ , Li^{++} радиусы первых боровских орбит и скорости электрона на них, кинетическую энергию электрона и его энергию связи в основном состоянии, первый потенциал возбуждения и соответствующую ему длину волны резонансной линии.

2.7. Определить квантовое число возбужденного состояния атома водорода, если известно, что при переходе в основное состояние атом излучил:

- а) фотон $\lambda = 97,25$ нм;
- б) два фотона $\lambda_1 = 656,3$ нм и $\lambda_2 = 121,6$ нм.

2.3. Ответы и решения

2.1. Решение.

1. Полная энергия электрона в атоме водорода может быть записана в виде:

$$E = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}.$$

Продифференцируем это выражение по времени:

$$\frac{dE}{dt} = \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \frac{dr}{dt}.$$

Из условия задачи имеем

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{2e^2}{12\pi\epsilon_0 c^3} |\ddot{a}|^2.$$

Найдем величину центростремительного ускорения электрона из второго закона Ньютона:

$$m_e a = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \Rightarrow a = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{m_e r^2}.$$

Приравняв правые части выражений для производной $\frac{dE}{dt}$ и одновременно подставляя полученное выражение для ускорения, получим

$$\begin{aligned} \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \frac{dr}{dt} &= -\frac{e^6}{96\pi^3 \epsilon_0^3 c^3 m_e^2 r^4} \Rightarrow \\ \Rightarrow dt &= -\frac{12\pi^2 \epsilon_0^2 c^3 m_e^2 r^2}{e^4} dr \Rightarrow \\ \Rightarrow \tau &= -\frac{12\pi^2 \epsilon_0^2 c^3 m_e^2}{e^4} \int_{r_0}^0 r^2 dr = \frac{4\pi^2 \epsilon_0^2 c^3 m_e^2}{e^4} r_0^3 = 1,3 \cdot 10^{-11} \text{ с.} \end{aligned}$$

$$2.2. \quad E_{\text{св}} = E_{\text{св,Н}} Z^2 = \frac{hc}{\lambda \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)} = 54,4 \text{ эВ, где } n=2, m=5; Z -$$

порядковый номер химического элемента, определяемый в данной задаче из соотношения $Z = \sqrt{\frac{E_{\text{св}}}{E_{\text{св,Н}}}} = \sqrt{\frac{54,4}{13,6}} = 2$, где $E_{\text{св}}$ – энергия связи рассматриваемого иона; $E_{\text{св,Н}}$ – энергия связи электрона в атоме водорода.

2.3. Решение.

E_0 – это энергия, необходимая для удаления первого из электронов из атома гелия. После удаления первого электрона атом гелия превращается в водородоподобный ион, при этом энергия связи оставшегося электрона может быть найдена из выражения

$$E_1 = E_{\text{св,Н}} \cdot Z^2 = E_{\text{св,Н}} \cdot 2^2 = 13,6 \text{ эВ} \cdot 4 = 54,4 \text{ эВ, где } Z=2.$$

Для удаления обоих электронов понадобится энергия

$$E = E_0 + E_1 = 24,6 + 54,4 = 79,0 \text{ эВ.}$$

2.4. Решение.

Неизменность кинетической энергии атома до и после процесса излучения означает также неизменность модуля импульса до и после процесса излучения, то есть

$$p_0 = p.$$

Систему "атом-фотон" можно считать замкнутой, поэтому её импульс сохраняется (см. рис. 2.3):

$$\vec{p}_0 = \vec{p} + \vec{p}_\phi,$$

где

$$p_\phi = \frac{h}{\lambda} = hR \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right);$$

$$p_0 = p = m_{\text{ат}} v_0 \approx m_p v_0.$$

Здесь $m_{\text{ат}}$ – масса атома, m_p – масса протона (с достаточной точностью можно считать, что $m_{\text{ат}} \approx m_p$).

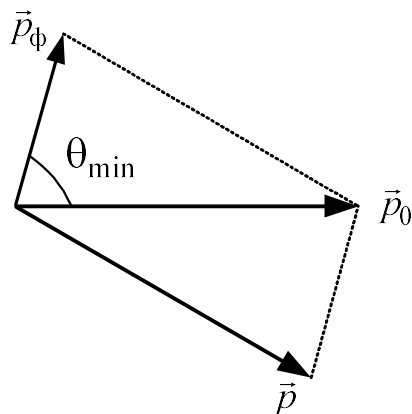


Рис. 2.3. Векторная диаграмма взаимодействия фотона с атомом водорода

Запишем закон сохранения импульса в скалярной форме:

$$p^2 = p_{\phi}^2 + p^2 - 2p_{\phi}p \cos \theta \Rightarrow p_{\phi} = 2p \cos \theta \Rightarrow \cos \theta = \frac{p_{\phi}}{2p}$$

или

$$\cos \theta = \frac{hR \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)}{2m_p v_0} = 0,5 \Rightarrow \theta = 60^\circ.$$

$$2.5. v = \sqrt{\frac{2E_{\text{св,Н}} \left[Z^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) - 1 \right]}{m_e}} = 2,44 \cdot 10^6 \text{ м/с}, \text{ где } E_{\text{св,Н}} -$$

энергия связи электрона в атоме водорода, $Z = 2$; $n = 1$, $m = 2$.

2.6. Решение.

Запишем для электрона, вращающегося по круговой орбите, систему уравнений, состоящую из второго закона Ньютона $ma_{\text{ц}} = F_{\text{К}}$, и постулата о квантовании орбит:

$$\begin{cases} \frac{m_e v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2}, \\ m_e v r = n\hbar. \end{cases}$$

После деления первого уравнения на второе получим

$$v = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 n\hbar}.$$

Подставляя числовые значения, найдём скорости:

$$v_{\text{H}} = 2,19 \cdot 10^6 \text{ м/с};$$

$$v_{\text{He}^+} = 4,38 \cdot 10^6 \text{ м/с};$$

$$v_{\text{Li}^{++}} = 6,57 \cdot 10^6 \text{ м/с}.$$

Для определения радиусов первой боровской орбиты воспользуемся той же системой уравнений, в которой второе уравнение возведём предварительно к квадрат:

$$\begin{cases} \frac{m_e v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2}, \\ m_e^2 v^2 r^2 = n^2 \hbar^2. \end{cases}$$

После деления второго уравнения на первое получим

$$m_e r = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 n^2}{Ze^2},$$

откуда

$$r = r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 n^2}{m_e Ze^2}.$$

Для радиуса первой боровской орбиты следует взять $n=1$. Из выражения, полученного для r , видно, что радиусы первых орбит для ионов He^+ и Li^{++} будут меньше радиуса боровской орбиты в Z раз.

Расчёты дают:

для атома водорода

$$r_{n,\text{H}} = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 n^2}{m_e Z_{\text{H}} e^2} = 0,53 \text{ \AA};$$

для иона He^+

$$r_{n,\text{He}^+} = \frac{r_{n,\text{H}}}{Z_{\text{He}^+}} = 0,265 \text{ \AA};$$

для иона Li^{++}

$$r_{n,\text{Li}^{++}} = \frac{r_{n,\text{H}}}{Z_{\text{Li}^{++}}} = 0,177 \text{ \AA}.$$

Кинетическую энергию электрона удобно найти, используя уравнение для второго закона Ньютона, в котором разделим на 2 обе части уравнения и одновременно умножим их на r . Тогда

$$E_{\text{к}} = \frac{m_e v^2}{2} = \frac{1}{2 \cdot 4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}.$$

После подстановки выражения для радиуса орбиты получим

$$E_{\text{к}} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m_e e^4 Z^2}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}.$$

Как видно из полученной формулы, кинетические энергии валентных электронов ионов в Z^2 раз больше кинетической энергии электрона в атоме водорода. Результаты расчётов:

$$E_{\text{к,Н}} = 13,6 \text{ эВ};$$

$$E_{\text{к,He}^+} = E_{\text{к,Н}} \cdot Z_{\text{He}^+}^2 = 54,4 \text{ эВ};$$

$$E_{\text{к,Li}^{++}} = E_{\text{к,Н}} \cdot Z_{\text{Li}^{++}}^2 = 122,4 \text{ эВ}.$$

Энергия связи электронов равна модулю полной энергии электрона в атоме, находящемся в основном состоянии. Поэтому сначала необходимо найти полную энергию, которая складывается в классической механике из кинетической и потенциальной энергий электрона. Потенциальную энергию U находим как энергию взаимодействия электрона и положительного заряда ядра:

$$U = (-e)\phi_{\text{ядра}} = (-e) \frac{q_{\text{ядра}}}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}.$$

Абсолютная величина потенциальной энергии в два раза больше абсолютной величины кинетической энергии. Следовательно, полная энергия электрона равна кинетической энергии электрона, взятой с противоположным знаком, т.е.

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = -\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m_e e^4 Z^2}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}.$$

Следовательно, энергия связи электрона равна модулю полной энергии и, следовательно, совпадает с кинетической энергией электрона:

$$E_{\text{св}} = -E_n = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m_e e^4 Z^2}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}.$$

Тогда

$$E_{\text{св,Н}} = E_{\text{к,Н}} = 13,6 \text{ эВ};$$

$$E_{\text{св, He}^+} = E_{\text{к, He}^+} = 54,4 \text{ эВ};$$

$$E_{\text{св, Li}^{++}} = E_{\text{к, Li}^{++}} = 122,4 \text{ эВ}.$$

Первый потенциал возбуждения находим из равенства

$$e\varphi = E_2 - E_1 = E_1 Z^2 \left(1 - \frac{1}{2^2}\right) = E_1 Z^2 \frac{3}{4},$$

откуда

$$\varphi = \frac{3E_1 Z^2}{4e}.$$

Тогда, первый потенциал возбуждения

$$\varphi_{\text{H}} = 10,2 \text{ В};$$

$$\varphi_{\text{He}^+} = 40,8 \text{ В};$$

$$\varphi_{\text{Li}^{++}} = 91,8 \text{ В}.$$

Длину волны резонансной линии рассчитаем из выражения

$$\frac{1}{\lambda} = RZ^2 \left(1 - \frac{1}{2^2}\right) = RZ^2 \frac{3}{4},$$

откуда

$$\lambda = \frac{4}{3RZ^2}.$$

$$\lambda_{\text{H}} = 121,6 \text{ нм};$$

$$\lambda_{\text{He}^+} = 30,4 \text{ нм};$$

$$\lambda_{\text{Li}^{++}} = 13,5 \text{ нм}.$$

2.7. а) $m = 4$; б) $m = 3$; схема переходов $3 \rightarrow 2 \rightarrow 1$.

3. ОДНОМЕРНОЕ ДВИЖЕНИЕ ЭЛЕКТРОНА В ПОТЕНЦИАЛЬНОМ ПОЛЕ

3.1. Основные понятия и формулы

Каждое состояние микрочастицы может быть описано некоторой функцией координат и времени $\Psi(x, y, z, t)$ (волновой функцией), квадрат модуля которой определяет вероятность обнаружения частицы в пределах объёма dV :

$$dP = |\Psi|^2 dV = \Psi^* \Psi dV,$$

где знак * означает комплексное сопряжение.

Из вероятностного смысла волновой функции вытекает условие нормировки:

$$\int_{V \rightarrow \infty} |\Psi|^2 dV = 1.$$

Временное уравнение Шрёдингера позволяет определить в любой момент времени волновую функцию для частицы с массой m_0 , движущейся в силовом поле с потенциальной энергией $U(x, y, z, t)$. Это уравнение имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta \Psi + U \Psi,$$

где $\Delta = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ – оператор Лапласа.

Если силовое поле, в котором движется частица, стационарно, то U не зависит явно от времени, и в этом случае решение уравнения Шрёдингера можно представить в виде произведения двух множителей, один из которых зависит только от времени, другой – от координат:

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et\right),$$

где E – полная энергия частицы. После подстановки этой функции во временное уравнение Шрёдингера и сокращения на множитель $\exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et\right)$ можно получить стационарное уравнение Шрёдингера, которое часто представляют в виде

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m_0}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0.$$

Для волновой функции выполняется уравнение непрерывности для поля вероятности:

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0,$$

где $\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m_0} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi)$ – вектор плотности тока вероятности.

Каждой физической величине соответствует оператор этой физической величины – это математическое правило, которое преобразовывает одну функцию в другую. Оператор обозначают буквой со "шляпкой" над ней, например, \hat{Q} .

Примеры операторов:

– операторы координаты $\hat{x} = x$; $\hat{y} = y$; $\hat{z} = z$;

– операторы проекций импульса $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$; $\hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$; $\hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$;

– векторный оператор импульса $\hat{\vec{p}} = -i\hbar \nabla$, где $\nabla = \vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z}$;

– оператор квадрата импульса $\hat{p}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$ или $\hat{p}^2 = -\hbar^2 \Delta$;

– оператор кинетической энергии $\hat{E}_k = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta$;

– оператор потенциальной энергии $\hat{U} = U$;

– оператор полной энергии (гамильтониан) $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta + U$.

Среднее значение физической величины Q находят из выражения

$$\langle Q \rangle = \int_V \Psi^* \hat{Q} \Psi dV.$$

Электрон в прямоугольной потенциальной яме.

Рассмотрим одномерное движение частицы в области, ограниченной прямоугольными потенциальными стенками (см. рис. 3.1). Потенциальная энергия частицы

$$U(x) = \begin{cases} \infty & \text{при } x < 0 \text{ и } x > l, \\ 0 & \text{при } 0 < x < l. \end{cases}$$

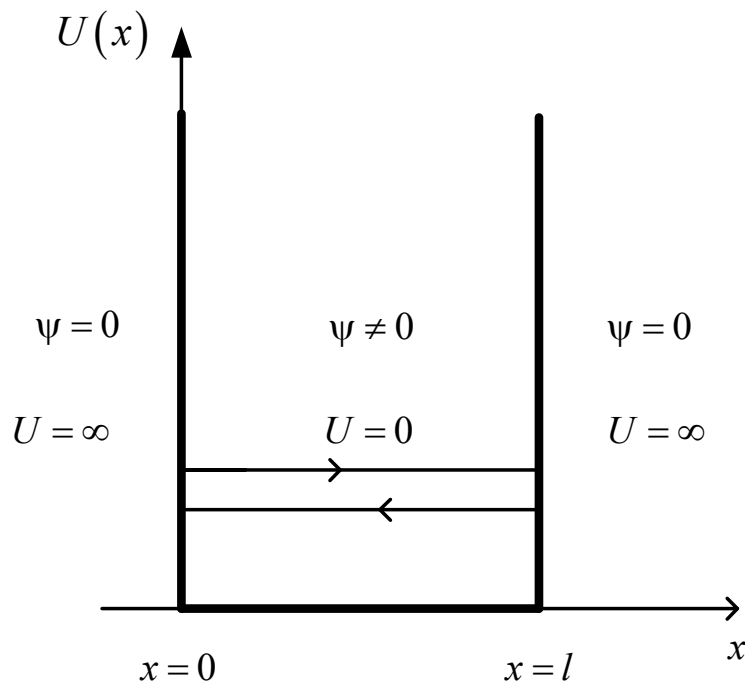


Рис. 3.1. Движение частицы в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме

На интервале $0 < x < l$ электрон движется свободно, но за пределы отрезка $[0; l]$ выйти не может. Вероятность обнаружить электрон вне пределов ямы равна нулю, в ноль обращается и волновая функция.

Классический электрон внутри отрезка l будет совершать колебательное движение, периодически упруго отражаясь от потенциальных стенок (энергия сохраняется).

Стационарное состояние квантового электрона – суперпозиция двух встречных волн де Бройля (стоячая волна де Бройля), каждая из которых отвечает свободному движению с импульсом $p_x = p > 0$ и $p_x = -p < 0$.

Внутри ямы $U = 0$ можем воспользоваться стационарным уравнением Шрёдингера:

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0 \quad \text{или} \quad \frac{d^2 \psi}{dx^2} + k^2 \psi = 0, \quad \text{где} \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E.$$

Стационарные волновые функции этих состояний

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= C_1 e^{\frac{i}{\hbar} p_x x} = C_1 e^{ikx}, \\ \psi_2(x) &= C_2 e^{\frac{i}{\hbar} p_x x} = C_2 e^{-ikx}, \end{aligned}$$

где $k = \frac{p}{\hbar}$ – волновое число.

Энергия электрона $E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ не зависит от знака проекции.

Раскладывая экспоненты по формуле Эйлера, получим

$$\psi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx),$$

где A и B – константы.

Из условия непрерывности следует, что на границах ямы $\psi = 0$.

При $x = 0$

$$\begin{aligned}\psi(0) = 0 &\Rightarrow A = 0; B \neq 0; \\ \psi(x) &= B \sin(kx).\end{aligned}$$

На правой границе ($x = l$)

$$\psi(l) = B \sin(kl) = 0.$$

Так как $B \neq 0$, то должно выполняться условие $\sin(kl) = 0$.

Следовательно,

$$kl = n\pi \quad (n = 1, 2, 3...),$$

откуда находим значения модуля волнового вектора

$$k = k_n = \frac{n\pi}{l}.$$

Правило квантования энергии находим из выражения $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$:

$$E = E_n = \frac{\hbar^2}{8ml^2} n^2.$$

Ограниченное в пространстве движение называется **финитным**, неограниченное – **инфинитным**.

Финитное движение всегда квантуется, стационарные состояния финитной системы характеризуется набором целочисленных параметров (квантовых чисел), число которых равно числу степеней свободы системы.

Схема энергетических уровней частицы показана на рис. 3.2.

Энергия состояния растёт пропорционально квадрату квантового числа n . Минимальная энергия частицы равна

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{8ml^2}.$$

Отметим, что при $l \rightarrow 0$ $E_1 \rightarrow \infty$. Это означает, что для точной локализации электрона необходимо затратить бесконечно большую энергию.

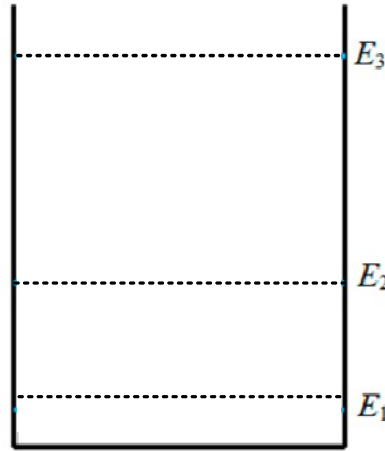


Рис. 3.2. Схема энергетических состояний частицы в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме

Волновые функции

Каждому стационарному состоянию n отвечает стационарная волновая функция

$$\psi_n(x) = B \sin(k_n x) = B \sin\left(\frac{\pi n x}{l}\right),$$

где B – нормировочная константа.

Коэффициент B найдём из условия нормировки

$$\int_0^l \psi(x) \psi^*(x) dx = 1$$

или

$$B^2 \int_0^l \sin^2\left(\frac{n\pi}{l} x\right) dx = B^2 \frac{l}{2} = 1,$$

откуда получим

$$|B| = \sqrt{\frac{2}{l}}; \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{\pi n x}{l}\right).$$

Вид ψ -функций, а также квадраты их модулей для первых трёх состояний показаны на рис. 3.3.

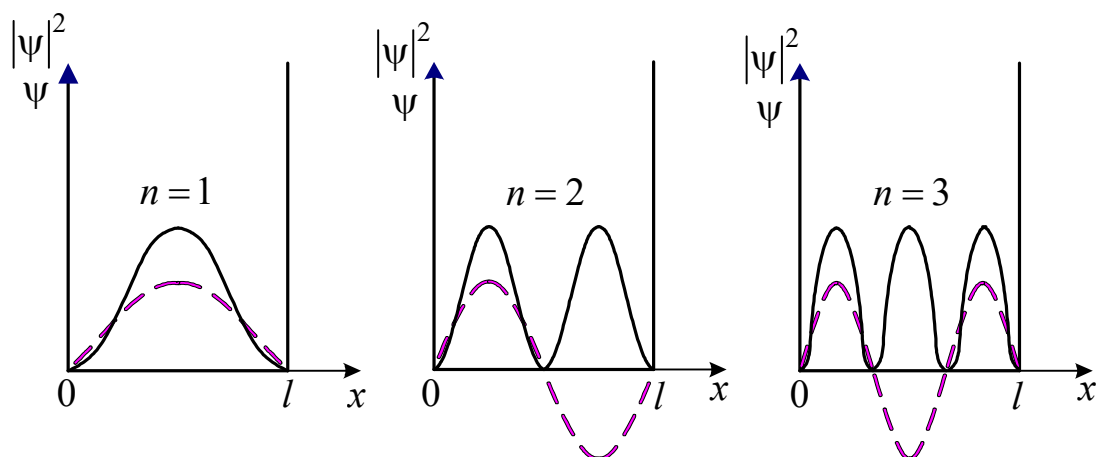


Рис. 3.3. Вид ψ -функций и квадратов их модулей для частицы в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме

3.2. Задачи

3.1. Частица находится в основном состоянии в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной l с абсолютно непроницаемыми стенками ($0 \leq x \leq l$). Найти вероятность местонахождения частицы в интервале $\frac{1}{3}l \leq x \leq \frac{2}{3}l$.

3.2. Известно, что нормированная собственная волновая функция, описывающая состояние электрона в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной l с абсолютно непроницаемыми стенками, имеет вид $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{n\pi}{l}x\right)$ при $0 \leq x \leq l$. Определить средние значения координаты $\langle x \rangle$ и квадрата координаты $\langle x^2 \rangle$. Сравнить $\langle x \rangle$ и $\sqrt{\langle x^2 \rangle}$.

3.3. При какой ширине бесконечно глубокой потенциальной ямы минимальная энергия электрона совпадает с энергией ионизации атома водорода?

3.4. Определить число связанных стационарных состояний в прямоугольной потенциальной яме глубиной U_0 и шириной l .

3.5. В прямоугольной потенциальной яме глубиной $U_0 = 0,1$ эВ, показанной на рис. 3.4, образуется связанное состояние с минимальной энергией $E_1 = 0,05$ эВ. Определить ширину потенциальной ямы.

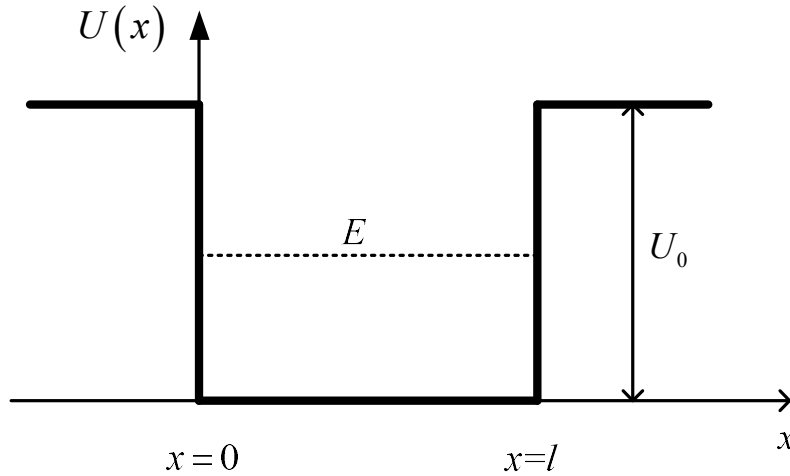


Рис. 3.4. Энергия частицы в одномерной потенциальной яме конечной глубины

3.6. Частица массы m движется в одномерном потенциальном поле $U(x) = 0, x < 0; U(x) = U_0, x > 0$. Определить волновую функцию частицы при заданной плотности потока, падающего слева на потенциальную стенку. Найти плотность вероятности и плотность тока вероятности во всех точках пространства. Вычислить коэффициенты прохождения и отражения, рассмотрев случай, когда энергия частицы $E > U_0$. Сравнить решение квантово-механической задачи с распространением плоской электромагнитной волны в среде со скачком показателя преломления.

3.7. Частица массы m движется в одномерном потенциальном поле $U(x) = 0, x < 0; U(x) = U_0, x > 0$. Определить волновую функцию частицы при заданной плотности потока, падающего слева на потенциальную стенку. Найти плотность вероятности и плотность тока вероятности во всех точках пространства. Вычислить коэффициенты прохождения и отражения, рассмотрев случай, когда энергия частицы $E < U_0$.

3.8. Частица массы m движется в одномерном потенциальном поле $U(x) = 0, x < 0, x > a; U(x) = U_0, 0 < x < a$ (прямоугольный потенциальный барьер). Считая плотность падающего слева на барьер потока заданной, определить волновую функцию, плотность вероятности

и плотность тока вероятности во всех точках пространства; коэффициенты прохождения и отражения (рассмотреть случай, когда энергия частицы E меньше высоты барьера).

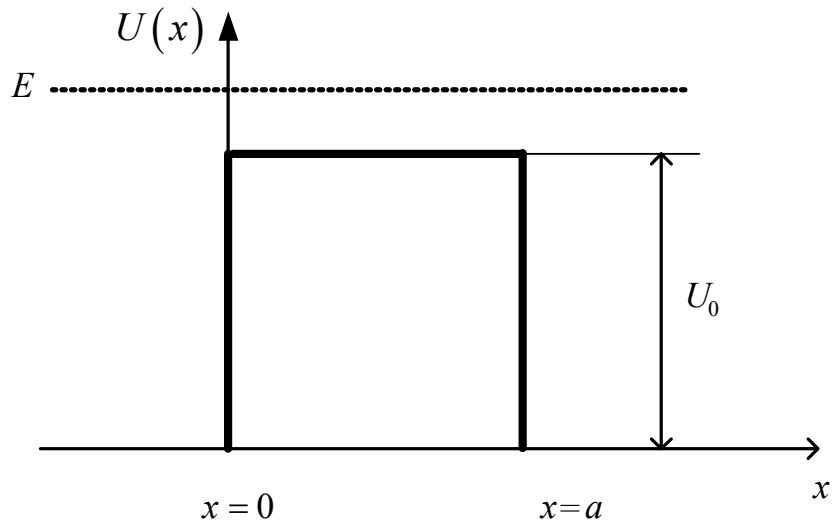


Рис. 3.5. Движение частицы с энергией больше высоты потенциального барьера прямоугольной формы конечной ширины

3.9. Частица массы m с энергией E движется в одномерном потенциальном поле $U(x)=0$ при $x < 0$, $x > a$; $U(x)=U_0 < E$ при $0 < x < a$ (прямоугольный потенциальный барьер, см. рис. 3.5). Найти коэффициент прозрачности D и коэффициент отражения R . При каких значениях E частица будет беспрепятственно проходить через данную яму, не испытывая отражения?

3.10. Вычислить среднее значение импульса и квадрата импульса частицы массы m , заключённой в одномерную бесконечно глубокую потенциальную яму ширины l и находящейся в основном состоянии.

3.3. Ответы и решения

$$3.1. P = \int_{l/3}^{2l/3} \frac{2}{l} \sin^2\left(\frac{\pi}{l}x\right) dx = 0,61 \text{ (см. рис. 3.6).}$$

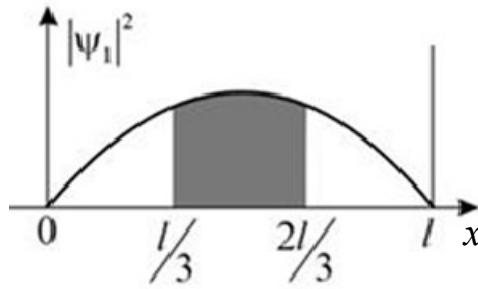


Рис. 3.6. Площадь под графиком $|\psi|^2(x)$ равна вероятности местонахождения частицы в выбранном интервале

3.2. $\langle x \rangle_n = \frac{l}{2}$; $\langle x^2 \rangle_n = \frac{l^2}{3} \left(1 - \frac{3}{2n^2\pi^2} \right)$; среднее квадратичное отклонение координаты от среднего значения

$$\Delta x_{\text{КВ}} = \sqrt{\langle x^2 \rangle_n - \langle x \rangle_n^2} = \frac{l}{2} \sqrt{\frac{1}{3} \left(1 - \frac{6}{n^2\pi^2} \right)}.$$

3.3. 0,17 нм.

3.4. Решение.

Потенциальная энергия частицы по условию $U(x) = 0$ при $0 < x < l$ и $U(x) = U_0 > 0$ при $x < 0$ и $x > l$ (см. рис. 3.7).

Запишем стационарное уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + U\psi = E\psi, \quad E < U_0.$$

Применим его для соответствующих интервалов.

При $0 < x < l$

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} = -k^2 \psi,$$

где $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ – волновое число.

Решением этого уравнения являются две встречные волны де Бройля

$$\psi(x) = a_1 e^{ikx} + a_2 e^{-ikx}$$

или

$$\psi(x) = A_1 \cos kx + A_2 \sin kx.$$

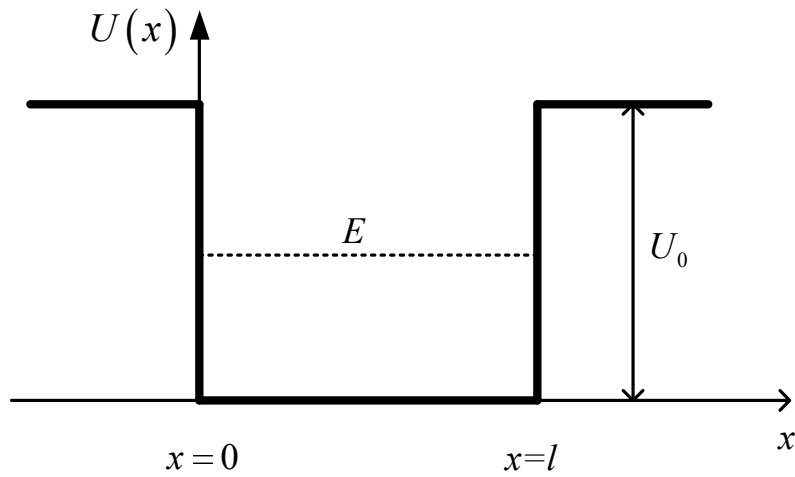


Рис. 3.7. Энергия частицы в одномерной потенциальной яме конечной глубины

При $x < 0$ и $x > l$

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} = \gamma^2 \psi,$$

где $\gamma = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$.

Решение этого уравнения

$$\psi = b_1 e^{\gamma x} + b_2 e^{-\gamma x}.$$

При $x < 0$

$$\psi = b_1 e^{\gamma x} = B_1 e^{\gamma x}, \quad b_2 = 0,$$

так как волна затухает при $x \rightarrow -\infty$.

При $x > l$

$$\psi = b_2 e^{-\gamma x} = B_2 e^{-\gamma(x-l)}, \quad b_1 = 0,$$

так как волна затухает при $x \rightarrow +\infty$;

$$B_2 = b_2 e^{-\gamma l}.$$

Для удобства представим полученные результаты в форме таблицы (см. табл. 3.1).

Таблица 3.1

ψ -функции и их первые производные

$x < 0$	$0 < x < l$	$x > l$
$\psi = B_1 e^{\gamma x}$	$\psi = A_1 \cos kx + A_2 \sin kx$	$\psi = B_2 e^{-\gamma(x-l)}$
$\psi' = B_1 \gamma e^{\gamma x}$	$\psi' = -k A_1 \sin kx + k A_2 \cos kx$	$\psi' = -B_2 \gamma e^{-\gamma(x-l)}$

Волновая функция должна быть непрерывной и гладкой во всех точках. Условие «сшивки» ψ -функции и её производной при $x = 0$:

$$B_1 = A_1; \gamma B_1 = kA_2; \gamma A_1 = kA_2.$$

Условие «сшивки» ψ -функции и её первой производной при $x = l$:

$$A_1 \cos kl + A_2 \sin kl = B_2;$$

$$-kA_1 \sin kl + kA_2 \cos kl = -\gamma B_2;$$

$$-kA_1 \sin kl + kA_2 \cos kl = -\gamma A_1 \cos kl - \gamma A_2 \sin kl.$$

Решаем систему уравнений, полученных при "сшивке" ψ - функции и её первой производной:

$$-kA_1 \sin kl + kA_2 \cos kl = -\gamma A_1 \cos kl - \gamma A_2 \sin kl$$

или

$$A_2 (k \cos kl + \gamma \sin kl) = A_1 (k \sin kl - \gamma \cos kl);$$

с учетом $\gamma A_1 = kA_2$

$$\frac{\gamma}{k} A_1 (k \cos kl + \gamma \sin kl) = A_1 (k \sin kl - \gamma \cos kl)$$

или

$$\gamma k \cos kl + \gamma^2 \sin kl = k^2 \sin kl - \gamma k \cos kl,$$

откуда получим

$$2\gamma k \cos kl + (\gamma^2 - k^2) \sin kl = 0.$$

Найдем множители $2\gamma k$ и $\gamma^2 - k^2$. Для этого с учётом выражений для γ и k найдем сумму их квадратов:

$$\gamma^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar}; k^2 = \frac{2mE}{\hbar}; \gamma^2 + k^2 = \frac{2mU_0}{\hbar}$$

и введём

$$\gamma = \frac{2mU_0}{\hbar} \cos\varphi; k = \frac{2mU_0}{\hbar} \sin\varphi,$$

где

$$\varphi = \arctg\left(\frac{k}{\gamma}\right) = \arctg\sqrt{\frac{E}{U_0 - E}}, 0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{2}.$$

Тогда множители $2\gamma k$ и $\gamma^2 - k^2$ равны соответственно

$$2\gamma k = \frac{2mU_0}{\hbar^2} \sin 2\varphi;$$

$$\gamma^2 - k^2 = \frac{2mU_0}{\hbar^2} \cos 2\varphi.$$

Подставим их в уравнение, полученное в результате "сшивки":

$$\frac{2mU_0}{\hbar^2} \sin 2\varphi \cos kl + \frac{2mU_0}{\hbar^2} \cos 2\varphi \sin kl = 0,$$

откуда

$$\begin{aligned} \sin(kl + 2\varphi) &= 0, \\ kl + 2\varphi &= n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots \end{aligned}$$

Подставим в последнее равенство выражение для k :

$$\frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar} l \sin \varphi + 2\varphi = n\pi.$$

Выразим отсюда n :

$$n = \frac{1}{\pi} \left(\frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar} l \sin \varphi + 2\varphi \right).$$

Правая часть монотонно изменяется от 0 до $\frac{1}{\pi} \left(\frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar} l + \pi \right)$.

Максимальное число связанных состояний равно

$$n_{\text{макс}} = N = \text{Int} \left(\frac{\sqrt{2mU_0}}{\pi\hbar} l + 1 \right),$$

где Int – целая часть полученного числа.

В такой яме реализуется хотя бы одно связанное состояние ($N \geq 1$).

3.5. Решение.

Из решения предыдущей задачи

$$\frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar} l \sin \varphi + 2\varphi = n\pi,$$

где $n = 1$ – минимальный уровень энергии,

$$\varphi = \varphi_1 = \arctg \left(\frac{k_1}{\gamma} \right) = \arctg \left(\sqrt{\frac{E_1}{U_0 - E_1}} \right),$$

где по условию задачи $E_1 = \frac{U_0}{2}$.

Следовательно,

$$\frac{E_1}{U_0 - E_1} = 1;$$

$$\varphi_1 = \arctg(1) = \frac{\pi}{4};$$

$$\sin \varphi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}};$$

$$\frac{\sqrt{2mU_0}}{\sqrt{2\hbar}}l + \frac{\pi}{2} = \pi;$$

$$l = \frac{\pi\hbar}{2\sqrt{mU_0}} = \frac{\pi \cdot 6,626 \cdot 10^{-34}}{2\sqrt{0,91 \cdot 10^{-30} \cdot 0,1 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}} = 1,3 \text{ (нм)}.$$

3.6. Решение

Классическая частица, налетая на барьер, продолжает движение вдоль x , уменьшив кинетическую энергию на величину U_0 . Квантовая частица с некоторой вероятностью может отразиться от барьера; токи вероятностей для соответствующих областей показаны на рис. 3.8.

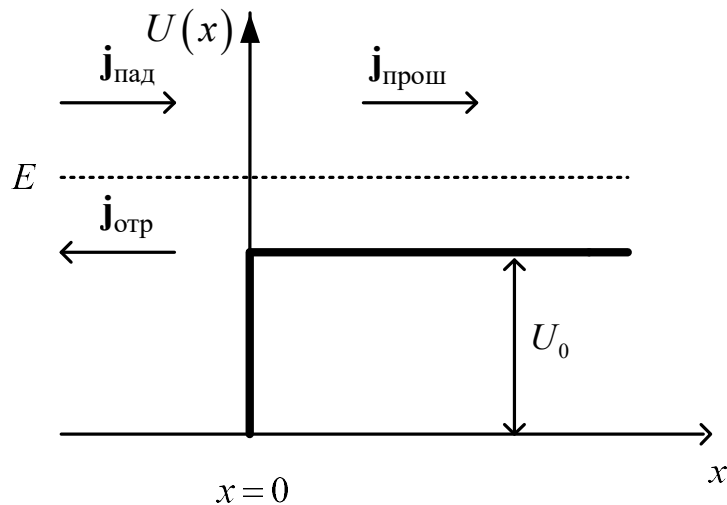


Рис. 3.8. Движение частицы над потенциальным барьером прямоугольной формы

Импульс частицы

$$p = \sqrt{2mE} \text{ при } x < 0 \text{ и } p' = \sqrt{2m(E - U_0)} \text{ при } x > 0.$$

Волновое число частицы

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \text{ при } x < 0 \text{ и } k' = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar} \text{ при } x > 0.$$

Волновая функция частицы

при $x < 0$ имеет вид двух встречных волн (падающей и отражённой)

$$\psi = \underbrace{a_1 e^{ikx}}_{\text{пад. волна}} + \underbrace{a_2 e^{-ikx}}_{\text{отр. волна}};$$

при $x > 0$ есть только прошедшая волна

$$\psi = \underbrace{b_1 e^{ik'x}}_{\text{прош. волна}}.$$

ψ -функции и их первые производные

$x < 0$	$x > 0$	$x = 0$
$\psi = a_1 e^{ikx} + a_2 e^{-ikx}$	$\psi = b_1 e^{ik'x}$	$a_1 + a_2 = b_1$
$\psi' = ik(a_1 e^{ikx} - a_2 e^{-ikx})$	$\psi' = ik'b_1 e^{ik'x}$	$k(a_1 - a_2) = k'b_1$

Коэффициенты a и b определяются из условия непрерывности волновой функции и её производной в точке $x = 0$ (условия "сшивки").

Используем условие непрерывности ψ -функции и её первой производной на границе барьера, т.е. в точке $x = 0$ (условие сшивки):

$$\begin{cases} a_1 + a_2 = b_1, \\ (a_1 - a_2)k = k'b_1. \end{cases}$$

Решая систему, находим связь коэффициентов a_1 , b_1 и a_2 :

$$a_2 = \frac{k - k'}{k + k'} a_1,$$

$$b_1 = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} a_1.$$

Следовательно,

при $x < 0$

$$\psi = a_1 e^{ikx} + \frac{2k}{k + k'} a_1 e^{-ikx};$$

при $x > 0$

$$\psi = \frac{2k}{k + k'} a_1 e^{ik'x}.$$

Найдём плотность вероятности из соотношения

$$\rho = \left(\frac{dP}{dx} \right) = |\psi|^2:$$

при $x < 0$

$$\rho = |a_1|^2 \left| e^{ikx} + \frac{k - k'}{k + k'} e^{-ikx} \right|^2;$$

при $x > 0$

$$\rho = |a_1|^2 \left| e^{ikx} \right|^2 \left| \frac{2k}{k + k'} \right|^2.$$

Проекция тока вероятности может быть найдена из выражения

$$j_x = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx} \right).$$

Определим проекцию плотности тока вероятности из условия задачи.

При $x < 0$

$$\begin{aligned} j_x &= -\frac{i\hbar}{2m} \left[(a_1^* e^{-ikx} + a_2^* e^{ikx}) ik (a_1 e^{ikx} - a_2 e^{-ikx}) - \right. \\ &\quad \left. - (a_1 e^{ikx} + a_2 e^{-ikx}) (-ik) (a_1^* e^{-ikx} - a_2^* e^{ikx}) \right] = \\ &= \frac{k\hbar}{2m}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\cdot (|a_1|^2 - a_1^* a_2 e^{-2ikx} + a_1 a_2^* e^{2ikx} - |a_2|^2 + |a_1|^2 - a_1 a_2^* e^{2ikx} + a_1^* a_2 e^{-2ikx} - |a_2|^2) = \\ &= \frac{k\hbar}{m} (|a_1|^2 - |a_2|^2) = j_{\text{пад}} - |j_{\text{отр}}|, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} j_{\text{пад}} &= \frac{k\hbar}{m} |a_1|^2; \\ |j_{\text{отр}}| &= \frac{k\hbar}{m} |a_2|^2 = \frac{p}{m} |a_2|^2. \end{aligned}$$

При $x > 0$

$$j_x = j_{\text{прош}} = \frac{k'\hbar}{m} |b_1|^2 = \frac{p'}{m} |b_1|^2.$$

Плотности токов вероятности (в проекции на ось x) для падающей, отраженной и прошедшей волн:

$$\begin{aligned} j_{\text{пад}} &= \frac{\hbar k_1}{m} |a_1|^2, \\ |j_{\text{отр}}| &= \frac{k\hbar}{m} |a_2|^2 = \frac{\hbar k}{m} \left| \frac{k-k'}{k+k'} \right|^2 |a_1|^2, \\ j_{\text{прош}} &= \frac{\hbar k'}{m} |b_1|^2 = \frac{\hbar k'}{m} \left| \frac{2k}{k+k'} \right|^2 |a_1|^2. \end{aligned}$$

Следовательно,

$$j_x = j_{\text{пад}} - j_{\text{отр}} = |a_1|^2 \left[\frac{\hbar k}{m} \left(1 - \left| \frac{k-k'}{k+k'} \right|^2 \right) \right].$$

Находим коэффициенты отражения R и прохождения D :

$$R = \frac{|j_{\text{отр}}|}{j_{\text{пад}}} = \frac{|k - k'|^2}{|k + k'|^2},$$

$$D = \frac{j_{\text{прош}}}{j_{\text{пад}}} = \frac{|4kk'|}{|k + k'|^2}$$

или (с учётом коэффициентов k и k')

$$R = \left(\frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - U_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - U_0}} \right)^2,$$

$$D = \frac{\sqrt{4E(E - U_0)}}{(\sqrt{E} + \sqrt{E - U_0})^2}.$$

Соотношение коэффициентов

$$R + D = 1.$$

Групповая скорость волны де Бройля на границе барьера скачком уменьшается в n раз:

$$n = \frac{\lambda_{B,1}}{\lambda_{B,2}} = \frac{v_2}{v_1}.$$

Выражая v_1 и v_2 через кинетическую энергию, получим

$$n = \frac{E - U_0}{E}.$$

В оптике коэффициенты отражения и прохождения соответственно равны

$$R = \left(\frac{n - 1}{n + 1} \right)^2,$$

$$D = \frac{4n}{(n + 1)^2},$$

где n – относительный показатель преломления, равный отношению скоростей волн в двух средах. Приведённый анализ показывает на глубокую аналогию, существующую между квантовой механикой и волновой оптикой.

3.7. Решение.

Классическая частица, налетая на барьер, отражается от него, изменив направление скорости на противоположное. Квантовая частица с

некоторой вероятностью может проникнуть под барьер; токи вероятностей для соответствующих областей показаны на рис. 3.9.

Импульс, волновое число и волновая функция падающей частицы:

$$p = \sqrt{2mE};$$

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

$$\psi = \underbrace{a_1 e^{ikx}}_{\text{пад. волна}} + \underbrace{a_2 e^{-ikx}}_{\text{отр. волна}}.$$

Импульс, волновое число и волновая функция падающей частицы

$$p = \sqrt{2mE};$$

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

$$\psi = \underbrace{a_1 e^{ikx}}_{\text{пад. волна}} + \underbrace{a_2 e^{-ikx}}_{\text{отр. волна}}.$$

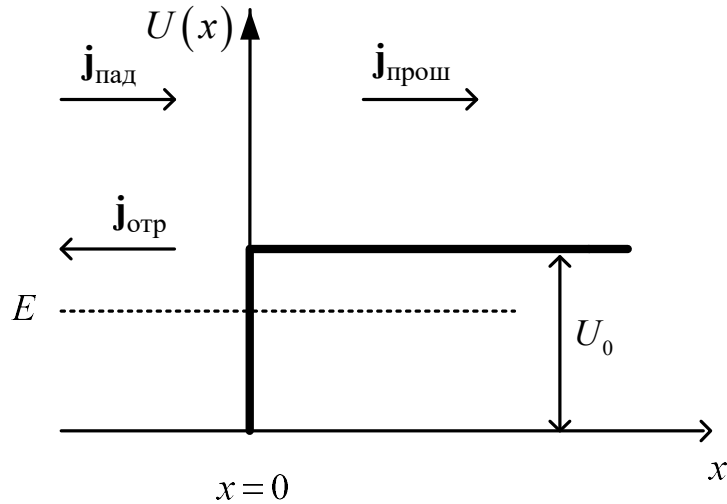


Рис. 3.9. Движение частицы с энергией, меньшей высоты потенциального барьера прямоугольной формы

Плотность тока вероятности

$$j_x = j_{\text{пад}} - j_{\text{отр}};$$

$$j_{\text{пад}} = \frac{k\hbar}{m} |a_1|^2 = \frac{p}{m} |a_1|^2;$$

$$j_{\text{отр}} = \frac{k\hbar}{m} |a_2|^2 = \frac{p}{m} |a_2|^2.$$

Уравнение Шрёдингера при $x > 0$ имеет вид

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \psi = 0$$

или

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} - \gamma^2 \psi = 0,$$

где $\gamma = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$ – коэффициент затухания.

Волновая функция при $x > 0$ имеет вид

$$\psi = b_1 e^{-\gamma x} + b_2 e^{\gamma x} = b_1 e^{-\gamma x},$$

где $b_2 = 0$ (функция должна затухать при $x \rightarrow +\infty$).

Коэффициенты a и b определяются из условия непрерывности волновой функции и её производной в точке $x = 0$ (условия "сшивки").

Таблица 3.3

ψ -функции и их первые производные

$x < 0$	$x > 0$	$x = 0$
$\psi = a_1 e^{ikx} + a_2 e^{-ikx}$	$\psi = b_1 e^{-\gamma x}$	$a_1 + a_2 = b_1$
$\psi' = ik(a_1 e^{ikx} - a_2 e^{-ikx})$	$\psi' = -\gamma b_1 e^{-\gamma x}$	$ik(a_1 - a_2) = -\gamma b_1$

Найдём связь коэффициентов:

$$ik(a_1 - a_2) = -\gamma(a_1 + a_2);$$

$$a_2 = -\frac{\gamma + ik}{\gamma - ik} a_1; \quad b_1 = -\frac{2ik}{\gamma - ik} a_1.$$

Поскольку

$$j_0 = j_{\text{пад}} = \frac{k\hbar}{m} |a_1|^2 = \sqrt{\frac{2E}{m}} |a_1|^2,$$

то коэффициент a_1 можно представить в виде

$$a_1 = \sqrt{j_0 \sqrt{\frac{m}{2E}}}.$$

Волновые функции

при $x < 0$

$$\psi = \sqrt{j_0 \sqrt{\frac{m}{2E}}} \left(e^{ikx} - \frac{\gamma + ik}{\gamma - ik} e^{-ikx} \right);$$

при $x > 0$

$$\Psi = -\sqrt{j_0 \sqrt{\frac{m}{2E}}} \frac{2ik}{\gamma - ik} e^{-\gamma x}.$$

Плотность тока вероятности

при $x < 0$

$$j_x = j_{\text{пад}} - j_{\text{отр}};$$

$$j_{\text{пад}} = j_0;$$

$$j_{\text{отр}} = \sqrt{\frac{2E}{m}} |a_2|^2 = \sqrt{\frac{2E}{m}} \left| \frac{\gamma - ik}{\gamma + ik} \right|^2 |a_1|^2 = \sqrt{\frac{2E}{m}} j_0 \sqrt{\frac{m}{2E}} = j_0;$$

при $x > 0$

$$\begin{aligned} j_x = j_{\text{пр}} &= -\frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \frac{d\Psi}{dx} - \Psi \frac{d\Psi^*}{dx} \right) = \\ &= -\frac{i\hbar}{2m} \left(b_1^* e^{-\gamma x} (-\gamma) b_1 e^{-\gamma x} - b_1 e^{-\gamma x} (-\gamma) b_1^* e^{-\gamma x} \right) = 0. \end{aligned}$$

Коэффициент отражения (вероятность)

$$R = \frac{j_{\text{отр}}}{j_{\text{пад}}} = 1.$$

Коэффициент прохождения (вероятность)

$$D = \frac{j_{\text{пр}}}{j_{\text{пад}}} = 0.$$

Найдём плотность вероятности:

при $x < 0$

$$\begin{aligned} \rho = |\Psi|^2 &= j_0 \sqrt{\frac{m}{2E}} \left(e^{-ikx} - \frac{\gamma - ik}{\gamma + ik} e^{ikx} \right) \left(e^{ikx} - \frac{\gamma + ik}{\gamma - ik} e^{-ikx} \right) = \\ &= j_0 \sqrt{\frac{m}{2E}} \left(1 - \frac{\gamma + ik}{\gamma - ik} e^{-2ikx} - \frac{\gamma - ik}{\gamma + ik} e^{2ikx} + 1 \right) \end{aligned}$$

или

$$\rho = j_0 \sqrt{\frac{2m}{E}} (1 - \cos(2kx - \varphi)) \quad (\text{уравнение стоячей волны}),$$

где $\varphi = \text{arctg} \left(\frac{2k\gamma}{\gamma^2 - k^2} \right);$

при $x > 0$

$$\rho = |\psi|^2 = j_0 \sqrt{\frac{2m}{E}} \frac{2k^2}{\gamma^2 + k^2} e^{-2\gamma x} \text{ (уравнение затухающей волны).}$$

$$3.8. \quad D = \frac{4 \frac{E}{U_0} \left(1 - \frac{E}{U_0}\right)}{4 \frac{E}{U_0} \left(1 - \frac{E}{U_0}\right) + \text{sh}^2 \left(\frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar} d \right)}.$$

$$R = 1 - D.$$

3.9. Решение.

Кинетическая энергия, импульс и волновое число частицы при $x < 0$:

$$E_k = E; \quad p = \sqrt{2mE}; \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar};$$

при $0 < x < a$

$$E_k = E - U_0; \quad p' = \sqrt{2m(E - U_0)}; \quad k' = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar};$$

при $a < x$

$$E_k = E; \quad p = \sqrt{2mE}; \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

ψ -функции и их первые производные запишем в форме таблицы (см. табл. 3.4).

Коэффициенты A , B , C определяем из условия непрерывности и гладкости при $x = 0$ и $x = a$ (условий "сшивки"):

$$A_1 + A_2 = B_1 + B_2; \quad B_1 e^{ik'a} + B_2 e^{-ik'a} = C;$$

$$ik(A_1 - A_2) = ik'(B_1 - B_2); \quad ik'(B_1 e^{ik'a} - B_2 e^{-ik'a}) = ikC.$$

Таблица 3.4

ψ -функции и их первые производные

$x < 0$	$x > 0$	$x = 0$
$\psi = \underbrace{A_1 e^{ikx}}_{\text{Пад. волна}} + \underbrace{A_2 e^{-ikx}}_{\text{Отр. волна}}$	$\psi = B_1 e^{ik'x} + B_2 e^{-ik'x}$	$\psi = \underbrace{C e^{ik(x-a)}}_{\text{Отражённой волны нет}}$
$\psi' = ik(A_1 e^{ikx} - A_2 e^{-ikx})$	$\psi' = ik'(B_1 e^{ik'x} - B_2 e^{-ik'x})$	$\psi' = ikC e^{ik(x-a)}$

Из первой пары уравнений получим

$$B_1 = \frac{k+k'}{2k'} A_1 - \frac{k-k'}{2k'} A_2; \quad B_2 = -\frac{k-k'}{2k'} A_1 + \frac{k+k'}{2k'} A_2;$$

из второй пары

$$k'(B_1 e^{ik'a} - B_2 e^{-ik'a}) = k(B_1 e^{ik'a} + B_2 e^{-ik'a}).$$

Обозначим

$$n = \frac{k}{k'},$$

тогда

$$B_1 = \frac{n+1}{2} A_1 - \frac{n-1}{2} A_2; \quad B_2 = -\frac{n-1}{2} A_1 + \frac{n+1}{2} A_2;$$

$$B_1 e^{ik'a} - B_2 e^{-ik'a} = n(B_1 e^{ik'a} + B_2 e^{-ik'a}).$$

Подставим выражения для коэффициентов B_1 и B_2 в последнее выражение:

$$\left(\frac{n+1}{2} A_1 - \frac{n-1}{2} A_2 \right) e^{ik'a} - \left(-\frac{n-1}{2} A_1 + \frac{n+1}{2} A_2 \right) e^{-ik'a} =$$

$$= n \left(\left(\frac{n+1}{2} A_1 - \frac{n-1}{2} A_2 \right) e^{ik'a} + \left(-\frac{n-1}{2} A_1 + \frac{n+1}{2} A_2 \right) e^{-ik'a} \right)$$

или

$$nA_1 \cos(k'a) + iA_1 \sin(k'a) - nA_2 \cos(k'a) + iA_2 \sin(k'a) =$$

$$= in^2 A_1 \sin(k'a) + nA_1 \cos(k'a) - in^2 A_2 \sin(k'a) + nA_2 \cos(k'a),$$

или

$$-2nA_2 \cos(k'a) + i(n^2 + 1)A_2 \sin(k'a) = i(n^2 - 1)A_1 \sin(k'a),$$

откуда находим связь коэффициентов A_1 и A_2 :

$$A_2 = -\frac{i(n^2 - 1)\sin(k'a)}{2n\cos(k'a) - i(n^2 + 1)\sin(k'a)} A_1.$$

Найдём коэффициент отражения

$$R = \frac{j_{\text{отр}}}{j_{\text{пад}}} = \frac{|A_2|^2}{|A_1|^2} = \frac{(n^2 - 1)^2 \sin^2(k'a)}{4n^2 \cos^2(k'a) + (n^2 + 1)^2 \sin^2(k'a)}.$$

Коэффициент прохождения найдём из выражения:

$$D = 1 - R.$$

Из полученной формулы следует, что частица пройдёт над барьером, не испытывая отражения, при выполнении условия

$$\sin(k'a) = 0$$

или

$$k'a = m\pi,$$

где m – целое число.

Отсюда

$$a = \frac{m\lambda'}{2},$$

где λ' – длина волны де Бройля над барьером.

Запишем это же условие для энергии:

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} m^2 + U_0.$$

3.10. Решение.

$$\psi(x) = \psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{\pi x}{l}\right).$$

Будем считать, что движение происходит вдоль оси x , тогда проекции импульсов $p_y = p_z = 0$;

$$\langle p_x \rangle = \int_0^l \psi^* \hat{p}_x \psi dx.$$

В координатном представлении оператор проекции $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$.

Тогда

$$\begin{aligned} \langle p_x \rangle &= -i\hbar \frac{2}{l} \int_0^l \sin \frac{\pi x}{l} \cdot \frac{d}{dx} \left(\sin \frac{\pi x}{l} \right) dx = \\ &= -i\hbar \frac{2}{l} \cdot \frac{\pi}{l} \int_0^l \sin \frac{\pi x}{l} \cdot \cos \frac{\pi x}{l} dx = \frac{-i\hbar \pi}{l^2} \int_0^l \sin \frac{2\pi x}{l} dx; \end{aligned}$$

$$\langle p_x \rangle = \frac{i\hbar}{2l} \cos \frac{2\pi x}{l} \Big|_0^l = \frac{i\hbar}{2l} (1-1) = 0.$$

В координатном представлении оператор квадрата проекции импульса и среднее значение квадрата проекции импульса определяются

выражениями: $\hat{p}_x^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ и $\langle p_x^2 \rangle = \int_0^l \psi^* \hat{p}_x^2 \psi dx$, тогда

$$\begin{aligned}
\langle p^2 \rangle &= -\hbar^2 \frac{2}{l} \int_0^l \sin \frac{\pi x}{l} \cdot \frac{d^2}{dx^2} \left(\sin \frac{\pi x}{l} \right) dx = \hbar^2 \frac{2}{l} \cdot \frac{\pi^2}{l^2} \int_0^l \sin^2 \frac{\pi x}{l} dx = \\
&= \frac{2\pi^2 \hbar^2}{l^3} \cdot \frac{1}{2} \int_0^l \left(1 - \cos \frac{2\pi x}{l} \right) dx = \frac{\pi^2 \hbar^2}{l^3} \cdot \left(x - \frac{l}{2\pi} \sin \frac{2\pi x}{l} \right) \Big|_0^l = \frac{\pi^2 \hbar^2}{l^2}; \\
\langle p^2 \rangle &= \frac{\pi^2 \hbar^2}{l^2} = 2mE_1.
\end{aligned}$$

4. КВАНТОВЫЙ ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

4.1. Основные понятия и формулы

Гармонический осциллятор в классической физике – система, совершающая гармонические колебания в поле упругой силы.

Потенциальная энергия осциллятора

$$U(x) = \frac{kx^2}{2} = \frac{m\omega^2 x^2}{2},$$

где $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ – частота колебаний.

Полная энергия (функция Гамильтона)

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}.$$

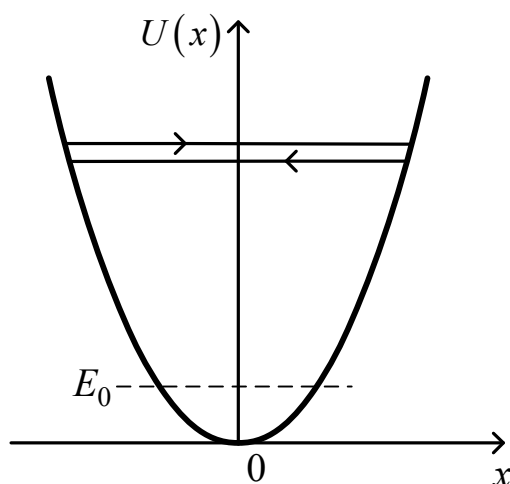


Рис. 4.1. Движение квантовой частицы в параболической потенциальной яме

Движение квантовой частицы (см. рис. 4.1):

1) финитно (ограничено в пространстве) – стационарные состояния квантуются (спектр энергии дискретен), состояние с наименьшей энергией $E_0 > 0$;

2) одномерно-стационарные состояния характеризуются одним квантовым числом.

Гамильтониан квантового осциллятора

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2}.$$

Стационарное уравнение Шрёдингера для вектора состояния (E – энергия стационарного состояния)

$$\hat{H}|a\rangle = E|a\rangle,$$

где E – энергия стационарного состояния.

Уравнение Шрёдингера для волновой функции

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \psi = E\psi.$$

Стационарное состояние $|n\rangle$ задаётся целым неотрицательным числом n . Правило квантования энергии гармонического осциллятора

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

где $n = 0, 1, 2, \dots$

Разрешённые значения энергии образуют эквидистантную систему уровней

$$E_{n+1} - E_n = \hbar\omega.$$

Минимальная энергия (энергия нулевых колебаний) имеет значение

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega.$$

Переход между состояниями осуществляется посредством лестничных операторов:

оператора уничтожения $\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} + i \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}} \hat{p}_x \right);$

оператора рождения $\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} - i \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}} \hat{p}_x \right).$

Операторы \hat{a} и \hat{a}^+ эрмитово сопряжены и не коммутируют друг с другом:

$$\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a} = [\hat{a}, \hat{a}^+] = 1;$$

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle;$$

$$\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle.$$

Стационарная волновая функция n -го состояния $\Psi_n(x)$ имеет вид

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi} \hbar}} \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/4} \psi_n(\xi),$$

где $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ – безразмерная координата;

$$\psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} \exp(-\xi^2 / 2) \cdot H_n(\xi);$$

$$H_n(\xi) = (-1)^n \exp(\xi^2) \frac{d^n}{d\xi^n} \exp(-\xi^2) – \text{полиномы Эрмита.}$$

Волновые функции нормированы:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(\xi)|^2 d\xi = 1.$$

4.2. Задачи

4.1. Волновые функции гармонического осциллятора в основном и первом возбуждённом состояниях $\Psi_0 = A_0 \exp(-x^2 / 2a^2)$, $\Psi_1 = A_1 x \exp(-x^2 / 2a^2)$, где $a = \sqrt{\hbar / m\omega}$. Найти нормировочные константы A_0 и A_1 и показать, что Ψ_0 и Ψ_1 ортогональны $\left(\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_0^* \Psi_1 dx = 0 \right)$.

4.2. Волновые функции стационарных состояний гармонического осциллятора в зависимости от безразмерной координаты $\xi = x / a$ даются выражением $\psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} \exp(-\xi^2 / 2) \cdot H_n(\xi)$, где H_n – полиномы Эрмита. Доказать, что соотношение $\psi_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{n+1}} \hat{a}^+ \psi_n$, где

$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)$, выполняется для произвольного n .

4.3. Найти наиболее вероятные значения координаты осциллятора в первом и втором возбуждённом состояниях (волновые функции вывести из условия задачи 3.1).

4.4. Частица массы m находится в некотором одномерном потенциальном поле $U(x)$, где $U(0) = 0$, в стационарном состоянии, волновая функция которого имеет вид $\psi(x) = A e^{-a^2 x^2}$, A , a – константы.

Найти $U(x)$ и энергию E частицы, используя уравнение Шрёдингера. Найти связь между константами A и a .

4.5. Квантовый гармонический осциллятор с частотой ω находится в стационарном состоянии $\psi(x) = Ae^{-a^2x^2}$, где A , a – константы. С помощью уравнения Шрёдингера найти энергию гармонического осциллятора и связь между константами A и a .

4.6. Гармонический осциллятор находится в первом возбуждённом состоянии. Выразить средние значения потенциальной и кинетической энергий осциллятора через минимальную энергию осциллятора.

4.7. Определить среднюю и наиболее вероятную координату линейного осциллятора (масса m , частота ω) в основном и первом возбуждённом состояниях.

4.3. Ответы и решения

4.1. $A_0 = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}$; $A_1 = \sqrt[4]{\frac{4m^3\omega^3}{\pi\hbar^3}}$; ортогональность функций ψ_0^* и

ψ_1 следует из интеграла $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0^* \psi_1 dx = A_0 A_1 \int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-\frac{2x^2}{2a^2}} dx = 0$, так как под интегралом находится нечётная функция.

4.2. Решение.

Подставим $H_n(\xi)$ в $\psi_n(\xi)$:

$$\begin{aligned} \psi_n &= \exp(-\xi^2/2) \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} \exp(\xi^2) \frac{d^n}{d\xi^n} (\exp(-\xi^2)) = \\ &= \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} \exp(\xi^2/2) \frac{d^n}{d\xi^n} (\exp(-\xi^2)). \end{aligned}$$

Переводим функцию ψ_n в ψ_{n+1} :

$$\psi_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{n+1}} \hat{a}^+ \psi_n =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\sqrt{n+1}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} \exp(\xi^2 / 2) \frac{d^n (\exp(-\xi^2))}{d\xi^n} = \\
&= \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} \frac{1}{\sqrt{n+1}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \exp(\xi^2 / 2) \frac{d^n (\exp(-\xi^2))}{d\xi^n} = \\
&= \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^{n+1} (n+1)! \sqrt{\pi}}} \times \\
&\times \left[\cancel{\xi \exp(\xi^2 / 2) \frac{d^n (\exp(-\xi^2))}{d\xi^n}} - \frac{2\xi}{2} \cancel{\exp(\xi^2 / 2) \frac{d^n (\exp(-\xi^2))}{d\xi^n}} - \right. \\
&\quad \left. - \exp(\xi^2 / 2) \frac{d^{n+1} (\exp(-\xi^2))}{d\xi^{n+1}} \right] = \\
&= \frac{(-1)^{n+1}}{\sqrt{2^{n+1} (n+1)! \sqrt{\pi}}} \exp(\xi^2 / 2) \frac{d^{n+1} (\exp(-\xi^2))}{d\xi^{n+1}}.
\end{aligned}$$

Как видим, $\psi_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{n+1}} \hat{a}^+ \psi_n$ справедливо для любого n .

4.3. Для первого возбуждённого состояния $x = \pm \sqrt{\hbar / m\omega}$; для второго возбуждённого состояния $x_1 = 0$; $x_{2,3} = \pm \sqrt{\frac{5}{2} \frac{\hbar}{m\omega}}$.

4.4. Решение.

Уравнение Шрёдингера запишем в виде

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

По условию $\psi(x) = A e^{-a^2 x^2}$ – волновая функция стационарного состояния частицы, поэтому она является решением уравнения Шрёдингера в нашем случае. Найдём её первую и вторую производные по x :

$$\frac{d\psi}{dx} = A (-a^2 2x) e^{-a^2 x^2},$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2 \psi}{dx^2} &= -2Aa^2 \left[x \left(-2a^2 x e^{-a^2 x^2} \right) + e^{-a^2 x^2} \right] = \\ &= 4Aa^4 x^2 e^{-a^2 x^2} - 2Aa^2 e^{-a^2 x^2}.\end{aligned}$$

Подставим производные в уравнение Шредингера:

$$4Aa^4 x^2 e^{-a^2 x^2} - 2Aa^2 e^{-a^2 x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(x)) A e^{-a^2 x^2} = 0$$

или

$$2a^4 x^2 - a^2 + \frac{m}{\hbar^2} (E - U(x)) = 0.$$

Найдём энергию E из условия $U(0)=0$:

$$-a^2 + \frac{m}{\hbar^2} E = 0,$$

откуда

$$E = \frac{a^2 \hbar^2}{m}.$$

Найдём потенциальную функцию. Для этого используем выражение

$$2a^4 x^2 - a^2 + \frac{m}{\hbar^2} (E - U(x)) = 0$$

с учетом того, что $a^2 = \frac{m}{\hbar^2} E$, откуда

$$2a^4 x^2 - \frac{m}{\hbar^2} U(x) = 0.$$

Следовательно, потенциальная функция определяется выражением

$$U(x) = \frac{2a^4 x^2 \hbar^2}{m}.$$

Найдём A и связь коэффициентов A и a из условия нормировки.

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx &= 1; \\ A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2a^2 x^2} dx &= 1.\end{aligned}$$

Введем следующую замену: $2a^2 x^2 = u^2$. Тогда $u = \pm a x \sqrt{2}$, оставляя положительный корень после дифференцирования получим $du = a \sqrt{2} dx$,

откуда $dx = \frac{du}{a \sqrt{2}}$.

Следовательно,

$$\frac{A^2}{a\sqrt{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u^2} du = \frac{A^2\sqrt{\pi}}{a\sqrt{2}} = 1, \text{ где } \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u^2} du = \sqrt{\pi}$$

откуда

$$A = \pm \sqrt{\frac{a\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}}}.$$

$$4.5. E = \frac{\hbar\omega}{2}; A = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}.$$

4.6. Решение.

Волновая функция первого возбуждённого состояния

$$\psi_1(x) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar}} \psi_1(\xi) = \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \psi_1(\xi),$$

где $a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$, $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x = \frac{x}{a}$ – безразмерная координата.

Тогда

$$\psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n(\xi);$$

$$\psi_1(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_1(\xi);$$

$$H_1(\xi) = (-1)^1 e^{\xi^2} \frac{d}{d\xi} e^{-\xi^2} = 2\xi;$$

$$\psi_1(\xi) = \sqrt{\frac{2}{\sqrt{\pi}}} \xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2}.$$

Воспользуемся оператором потенциальной энергии в координатном представлении:

$$U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2} = \frac{m\omega^2 a^2 \xi^2}{2} = \frac{\hbar\omega}{2} \xi^2,$$

то есть

$$U(\xi) = E_0 \xi^2.$$

Найдём среднее значение потенциальной энергии

$$\langle U \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} U(x) |\psi_1(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} U(\xi) |\psi_1(\xi)|^2 d\xi;$$

подставим $\psi_1(\xi)$:

$$\langle U \rangle = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} E_0 \xi^2 \xi^2 e^{-\xi^2} d\xi = \frac{2}{\sqrt{\pi}} E_0 \int_{-\infty}^{\infty} \xi^4 e^{-\xi^2} d\xi.$$

Учтём, что $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\beta}}$ и $x^2 e^{-\beta x^2} = -\frac{d(e^{-\beta x^2})}{d\beta}$.

Тогда

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\beta x^2} dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(-\frac{d}{d\beta} \right) e^{-\beta x^2} dx = -\frac{d}{d\beta} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta x^2} dx = \\ &= -\frac{d}{d\beta} \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\beta^3}}; \\ \int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-\beta x^2} dx &= -\frac{d}{d\beta} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\beta x^2} dx = -\frac{d}{d\beta} \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\beta^3}} \right) = \frac{3}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\beta^5}}; \\ \langle U \rangle &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} E_0 \int_{-\infty}^{\infty} \xi^4 e^{-\xi^2} d\xi = \frac{2}{\sqrt{\pi}} E_0 \frac{3}{4} \sqrt{\pi}. \end{aligned}$$

Среднее значение потенциальной энергии равно

$$\langle U \rangle = \frac{3}{2} E_0;$$

полная энергия состояния при $n = 1$ равна

$$E_1 = \hbar\omega \left(1 + \frac{1}{2} \right) = \frac{3}{2} \hbar\omega = 3E_0.$$

Поскольку $E = E_\kappa + U$, то при усреднении получим

$$E_1 = \langle E_\kappa \rangle + \langle U \rangle.$$

Следовательно,

$$\langle E_\kappa \rangle = \langle U \rangle = \frac{3}{2} E_0.$$

Другой способ решения

Запишем оператор кинетической энергии и лестничные операторы

$$\begin{aligned} \hat{E}_\kappa &= \frac{\hat{p}_x^2}{2m}; \\ \hat{a} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} + i \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}} \hat{p}_x \right); \end{aligned}$$

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} - i \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}} \hat{p}_x \right).$$

Выразим операторы \hat{p}_x , \hat{p}_x^2 и \hat{E}_κ через лестничные операторы:

$$\hat{p}_x = -\frac{i}{\sqrt{2}} \sqrt{m\hbar\omega} (\hat{a} - \hat{a}^+);$$

$$\hat{p}_x^2 = -\frac{1}{2} m\hbar\omega (\hat{a}\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}^+\hat{a}^+);$$

$$\hat{E}_\kappa = \frac{\hbar\omega}{4} (\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}\hat{a} - \hat{a}^+\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}) = \frac{E_0}{2} (\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}\hat{a} - \hat{a}^+\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}).$$

Среднее значение кинетической энергии по состоянию n равно

$$\begin{aligned} \langle E_\kappa \rangle &= \langle n | \hat{E}_\kappa | n \rangle = \frac{E_0}{2} (\langle n | \hat{a}\hat{a}^+ | n \rangle - \langle n | \hat{a}\hat{a} | n \rangle - \langle n | \hat{a}^+\hat{a}^+ | n \rangle + \langle n | \hat{a}^+\hat{a} | n \rangle) = \\ &= \frac{E_0}{2} (\sqrt{n+1} \langle n | \hat{a} | n+1 \rangle - \sqrt{n} \langle n | \hat{a} | n-1 \rangle - \\ &\quad - \sqrt{n+1} \langle n | \hat{a}^+ | n+1 \rangle + \sqrt{n} \langle n | \hat{a}^+ | n-1 \rangle) = \\ &= \frac{E_0}{2} ((n+1) \langle n | n \rangle - \sqrt{n(n-1)} \langle n | n-2 \rangle - \\ &\quad - \sqrt{(n+1)(n+2)} \langle n | n+2 \rangle + n \langle n | n \rangle). \end{aligned}$$

В силу ортонормированности базисных векторов получим

$$\langle n | n-2 \rangle = \langle n | n+2 \rangle = 0; \quad \langle n | n \rangle = 1.$$

Следовательно, среднее значение кинетической энергии по состоянию n равно

$$\langle E_\kappa \rangle = \frac{E_0}{2} (2n+1);$$

при $n=1$:

$$\langle E_\kappa \rangle = \frac{3E_0}{2}.$$

4.7. Для основного и первого возбуждённого состояний средняя координата $\langle x_0 \rangle = 0$ и $\langle x_1 \rangle = 0$; наиболее вероятная координата

$x_{\text{вер},0} = 0$ для основного состояния и $x_{\text{вер},1} = 0; \pm \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ – для первого возбуждённого состояния.

5. ДВИЖЕНИЕ ЧАСТИЦЫ В ЦЕНТРАЛЬНО-СИММЕТРИЧНОМ ПОЛЕ

5.1. Основные понятия и формулы

В центрально-симметричном поле потенциальная энергия

$$U = U(r),$$

где r – расстояние до силового центра.

Оператор кинетической энергии в координатном представлении имеет вид

$$\hat{E}_\kappa = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta,$$

где Δ – оператор Лапласа.

В случае сферической симметрии удобно использовать сферическую систему координат:

$$\hat{E}_\kappa = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{mr^2} \hat{L}^2$$

где \hat{L} – оператор модуля момента импульса.

Первое слагаемое – оператор кинетической энергии радиального движения, второе – энергия, обусловленная вращением частицы вокруг силового центра (центробежная энергия). Стационарное уравнение Шрёдингера в центрально-симметричном поле

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{mr^2} \hat{L}^2 \psi + U(r) \psi = E \psi.$$

Уравнение допускает разделение переменных:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

Здесь $R(r)$ – радиальная волновая функция, $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ – собственные функции операторов момента (шаровые функции):

$$\hat{L}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm},$$

$$\hat{L}_z Y_{lm} = \hbar m Y_{lm},$$

где l и m – орбитальное и магнитное квантовые числа.

$$l = 0, 1, 2, \dots; m = -l, -l+1, \dots, l.$$

Уравнение Шрёдингера для радиальной функции имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{mr^2} R + U(r) R = ER.$$

Для сферически-симметричного состояния ($l = 0$) волновая функция ψ не зависит от угловых переменных, а радиальная функция подчиняется уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + U(r)R = ER.$$

5.2. Задачи

5.1. Сферические волновые функции электрона в атоме водорода $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ (l, m – орбитальное и магнитное квантовые числа, θ, φ – полярный и азимутальный углы) для s- и p-состояний имеют вид $Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$;

$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$; $Y_{1\pm 1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{\pm i\varphi} \sin\theta$. Найти средние значения функций $\cos\theta$ и $\cos^2\theta$ для этих состояний.

5.2. Для состояния $|j, m\rangle$ с определённым значением величины момента импульса J и проекции момента $J_z = m\hbar$ найти средние значения квадратов проекций момента на декартовы координатные оси.

5.3. Электрон в сферической потенциальной яме с идеально отражающими стенками ($U = 0, r < R$; $U = \infty, r > R$) находится в сферически-симметричном состоянии $\psi = \psi(r)$, которое описывается уравнением Шрёдингера $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\psi}{dr} \right) = E\psi$. Определить волновые функции и возможные значения энергии, отвечающие стационарным состояниям.

5.4. Электрон движется в поле с потенциальной энергией $U = 0$ при $r < R$; $U = U_0 > 0$ при $r > R$ (сферическая потенциальная яма). Определить минимальное значение глубины ямы U_0 , при котором в ней возникают связанные состояния.

5.5. Основное состояние электрона в атоме водорода описывается волновой функцией $\psi_1(r) = (\pi a^3)^{-1/2} e^{-r/a}$, где $a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}$ – радиус первой боровской орбиты. Найти средние значения кинетической и потенциальной энергии электрона.

5.6. Определите, на каком расстоянии от ядра с наибольшей вероятностью можно обнаружить электрон в атоме водорода в 1s- и 2p- состояниях. Радиальные волновые функции электрона в этих состояниях следующие: $R_{1,0} = Ce^{-r/a}$; $R_{2,1} = B \frac{r}{2a} e^{-r/2a}$ (a – борковский радиус, C и B – нормировочные константы).

5.7. При какой ширине бесконечно глубокой потенциальной ямы минимальная энергия электрона совпадает с центробежной кинетической энергией электрона в атоме водорода в 2p-состоянии?

5.8. Частица массой m_0 движется в трёхмерном потенциальном поле $U(x, y, z) = \frac{k}{2}(x^2 + y^2 + z^2)$, где k – постоянная (трёхмерный гармонический осциллятор). Найдите собственные значения энергии частицы и кратность вырождения n -го энергетического уровня.

5.3. Ответы и решения

5.1. Решение.

Квадрат модуля шаровой функции определяет вероятность обнаружения электрона в единице телесного угла в направлении θ, φ :

$$dP(\theta, \varphi) = |Y_{lm}|^2 d\Omega = |Y_{lm}|^2 \sin\theta d\theta d\varphi.$$

Среднее значение произвольной функции угловых переменных $f(\theta, \varphi)$

$$\langle f \rangle = \int f(\theta, \varphi) |Y_{lm}|^2 d\Omega = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta f(\theta, \varphi) |Y_{lm}|^2.$$

Тогда

$$\langle \cos\theta \rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta \cos\theta |Y_{lm}|^2.$$

В s - состоянии

$$\langle \cos\theta \rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta \cos\theta \frac{1}{4\pi} = \frac{1}{2} \int_0^{\pi} \sin\theta \cos\theta d\theta.$$

Введём следующую замену $x = \cos\theta$. Тогда

$$\langle \cos\theta \rangle = -\frac{1}{2} \int_1^{-1} x dx = 0.$$

Найдём $\langle \cos \theta \rangle$ в p -состоянии при $m = 0$:

$$\langle \cos \theta \rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin \theta \cos \theta \frac{3}{4\pi} \cos^2 \theta = \frac{3}{2} \int_0^{\pi} \sin \theta \cos^3 \theta d\theta.$$

После замены $x = \cos \theta$ получим

$$\langle \cos \theta \rangle = -\frac{3}{2} \int_1^{-1} x^3 dx = 0.$$

Найдём $\langle \cos \theta \rangle$ в p -состоянии при $m = \pm 1$:

$$\langle \cos \theta \rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin^5 \theta \cos \theta \cdot \frac{3}{8\pi}.$$

После замены $x = \sin \theta$ получим

$$\langle \cos \theta \rangle = \frac{3}{4} \int_0^0 x^5 dx = 0.$$

Среднее значение $\langle \cos^2 \theta \rangle$ находим из выражения

$$\langle \cos^2 \theta \rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin \theta \cos^2 \theta |Y_{lm}|^2.$$

Среднее значение $\langle \cos^2 \theta \rangle$ для электрона в s -состоянии:

$$\langle \cos^2 \theta \rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin \theta \cos^2 \theta \cdot \frac{1}{4\pi} = -\frac{1}{2} \int_1^{-1} x^2 dx = -\frac{1}{6}(-1-1) = \frac{1}{3}.$$

Найдём $\langle \cos^2 \theta \rangle$ для электрона в p -состоянии при $m = 0$ (используем замену $x = \cos \theta$):

$$\begin{aligned} \langle \cos^2 \theta \rangle &= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin \theta \cos^2 \theta \frac{3}{4\pi} \cos^2 \theta = \\ &= \frac{3}{2} \int_0^{\pi} \sin \theta \cos^4 \theta d\theta = -\frac{3}{2} \int_1^{-1} x^4 dx = \frac{3}{5}. \end{aligned}$$

Найдём $\langle \cos^2 \theta \rangle$ для электрона в p -состоянии при $m = \pm 1$, используя ту же замену:

$$\langle \cos^2 \theta \rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin^3 \theta \cos^2 \theta \cdot \frac{3}{8\pi} = -\frac{3}{4} \int_1^{-1} (1-x^2)x^2 dx = \frac{1}{5}.$$

$$5.2. \langle J_x^2 \rangle = \langle J_y^2 \rangle = \langle J_z^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{3} j(j+1).$$

5.3. Решение.

Так как $\psi = f(r)$, воспользуемся оператором $\Delta_r = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right)$.

С учётом сферической симметрии ψ -функции и условия $U = 0$ для состояний частицы при $r < R$ уравнение Шрёдингера запишем в виде

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\psi}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0.$$

Представим ψ -функцию в виде $\psi = \frac{\chi(r)}{r}$.

Тогда

$$\begin{aligned} \frac{d\psi}{dr} &= \frac{d\psi}{dr} \left(\frac{\chi}{r} \right) = \frac{1}{r} \frac{d\chi}{dr} - \frac{\chi}{r^2}, \\ \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\chi}{dr} \right) &= \frac{d}{dr} \left(r \frac{d\chi}{dr} - \chi \right) = r \frac{d^2 \chi}{dr^2} + \frac{d\chi}{dr} - \frac{d\chi}{dr} = r \frac{d^2 \chi}{dr^2}, \\ \Delta_r &= \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\chi}{dr} \right) = \frac{1}{r} \frac{d^2 \chi}{dr^2}. \end{aligned}$$

Подставим найденное выражение оператора Δ_r в уравнение Шрёдингера:

$$\begin{aligned} \frac{1}{r} \frac{d^2 \chi}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \frac{\chi}{r} &= 0, \\ \frac{d^2 \chi}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \chi &= 0 \end{aligned}$$

или

$$\frac{d^2 \chi}{dr^2} + k^2 \chi = 0,$$

где $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$.

При $r > R$ $U = \infty$ и $\chi = 0$. Переменная r может принимать только неотрицательные значения. Формально можно считать, что r меняется в бесконечных пределах по обе стороны от точки $r = 0$, но при $r < 0$ волновая функция тождественно обращается в 0. Задача сводится к одномерному

движению частицы, ограниченному бесконечно высокими потенциальными стенками в точках $r = 0$ и $r = R$.

Решение уравнения Шрёдингера в пределах ямы $0 < r < R$

$$\chi = A \cos kr + B \sin kr.$$

Из условия непрерывности на левом краю $r = 0$ следует

$$\chi(0) = A = 0;$$

$$\chi = B \sin kr.$$

При $r = R$ $\psi = 0$, откуда следует $kR = \pi n$, $n = 1, 2, 3, \dots$. Тогда

$$k = \frac{\pi n}{R}.$$

С учётом всего сказанного запишем ψ -функцию следующим образом:

$$\psi = \frac{\chi(r)}{r} = \frac{B}{r} \sin \frac{\pi n}{R} r.$$

Находим амплитуду ψ -функции из условия нормировки:

$$B^2 \int_0^R \frac{1}{r^2} \sin^2 \frac{\pi n}{R} r \cdot 4\pi r^2 dr = 1,$$

где $4\pi r^2 dr = dV$ – элемент объёма сферы;

$$B^2 \cdot 4\pi \int_0^R \sin^2 \frac{\pi n}{R} r dr = 1$$

или

$$B^2 \cdot \frac{4\pi}{2} \int_0^R \left(1 - \cos \frac{2\pi n}{R} r\right) dr = 1 \Rightarrow B = (2\pi R)^{-1/2}.$$

Запишем окончательный вид ψ -функции:

$$\psi = (2\pi R)^{-1/2} \sin \frac{\pi n}{R} r.$$

Находим энергию частицы:

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E = \left(\frac{\pi n}{R}\right)^2 \Rightarrow E = E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mR^2} n^2,$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$.

5.4. Решение.

Минимальная энергия всегда отвечает сферически симметричному состоянию $l = 0$ – центробежная энергия отсутствует.

Волновая функция подчиняется радиальному уравнению Шрёдингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + U(r) \psi = E \psi.$$

Подстановкой $\psi(r) = \frac{\chi(r)}{r}$ сводим уравнение к виду (см. задачу 3.3)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \chi}{dr^2} + U(r) \chi = E \chi.$$

Одномерное движение вдоль оси r ограничивается бесконечно высокой потенциальной стенкой в точке $r = 0$, не допускающей проникновение электрона в область отрицательных расстояний (см. рис. 5.1).

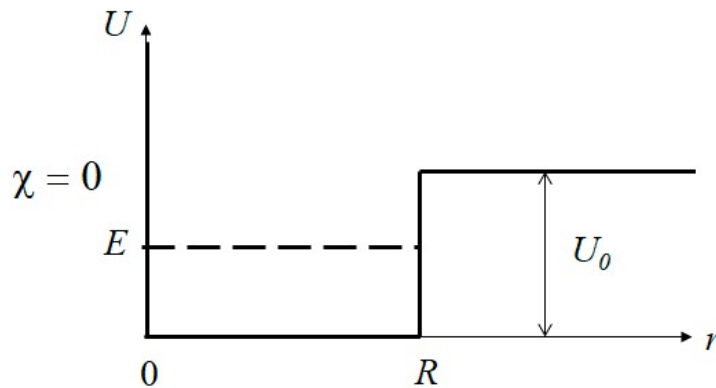


Рис. 5.1. Сферическая потенциальная яма

Запишем уравнение Шрёдингера для каждой из областей ямы:
при $r < 0$ $\chi = 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \chi}{dr^2} + U(r) \chi = E \chi;$$

при $0 < r < R$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \chi}{dr^2} = E \chi;$$

при $r > R$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \chi}{dr^2} + U_0 \chi = E \chi.$$

Перепишем уравнения Шрёдингера в более удобном для анализа виде с учётом соотношения величин E и U_0 :

при $0 < r < R$ в связанном состоянии энергия электрона $E < U_0$, поэтому

$$\frac{d^2 \chi}{dr^2} = -k^2 \chi,$$

где $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$;

при $r > R$:

$$\frac{d^2 \chi}{dr^2} = \gamma^2 \chi,$$

где $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, $\gamma = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$.

Решение уравнения Шрёдингера в пределах ямы $0 < r < R$

$$\chi = A \cos kr + B \sin kr.$$

Из условия непрерывности на левом краю $r = 0$ следует

$$\chi(0) = A = 0,$$

$$\chi = B \sin kr,$$

$$\chi' = kB \cos kr.$$

Волновая функция и её первая производная за пределами ямы $r > R$ имеют вид

$$\chi = Ce^{-\gamma(r-R)},$$

$$\chi' = -\gamma Ce^{-\gamma(r-R)}.$$

Условия «сшивки» в точке $r = R$:

$$B \sin kR = C,$$

$$kB \cos kR = -C\gamma,$$

$$kB \cos kR = -\gamma B \sin kR,$$

$$k \cos kR + \gamma \sin kR = 0.$$

Поскольку (см. задачу 3.4)

$$k^2 + \gamma^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} = \frac{2mU_0}{\hbar^2},$$

то полагая

$$k = \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar} \sin \varphi, \quad \gamma = \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar} \cos \varphi,$$

где

$$\varphi = \arctg\left(\frac{k}{\gamma}\right) = \arctg\left(\sqrt{\frac{E}{U_0 - E}}\right), \quad 0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{2},$$

получаем

$$\frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar} \cos kR \sin \varphi + \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar} \sin kR \cos \varphi = 0,$$

откуда

$$\begin{aligned} \sin(kR + \varphi) &= 0, \\ kR + \varphi &= n\pi, \quad n \in N, \\ \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar} R \sin \varphi + \varphi &= n\pi. \end{aligned}$$

Функция от φ в левой части монотонно возрастает от 0 до максимального значения

$$\frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar} R + \frac{\pi}{2},$$

поэтому

$$n\pi \leq \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar} R + \frac{\pi}{2},$$

откуда

$$n \leq \frac{\sqrt{2mU_0}}{\pi\hbar} R + \frac{1}{2}.$$

Для того, чтобы в яме образовалось хотя бы одно связанное состояние, необходимо, чтобы выполнялось условие

$$\frac{\sqrt{2mU_0}}{\pi\hbar} R + \frac{1}{2} \geq 1$$

или

$$U_0 \geq \frac{\pi^2 \hbar^2}{8mR^2}.$$

Если это условие не выполняется, то связанных состояний нет, то есть электрон не захватывается сферической ямой.

$$5.5. \langle U \rangle = -\frac{\kappa^2 m e^4}{\hbar^2} = -2E_{\text{св}}, \quad \langle E_{\text{к}} \rangle = \frac{\kappa^2 m e^4}{2\hbar^2} = E_{\text{св}}, \quad \text{где } \kappa = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}, \quad E_{\text{св}}$$

– энергия связи электрона в атоме водорода.

5.6. Для электрона в состоянии 1s: $r_{\text{вер}} = a$; для электрона в состоянии 2p: $r_{\text{вер}} = 4a$, где a – радиус первой борвской орбиты.

5.7. 23,5 нм.

5.8. $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{3}{2}\right)$; $n = n_1 + n_2 + n_3$; $n = 0, 1, 2, 3, \dots$; кратность вырождения равна $N_n = \sum_{n_1=0}^n (n - 1 + 1) = \frac{(n+1)(n+2)}{2}$.

6. АТОМ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СПИНА С МАГНИТНЫМ ПОЛЕМ

6.1. Основные понятия и формулы

Атом в магнитном поле

Магнитный момент электрона складывается из орбитального и спинового магнитных моментов:

$$\vec{M} = \vec{M}_L + \vec{M}_S.$$

Правило квантования проекции магнитных моментов:

$$M_{Lz} = -\mu_B m,$$

где M_{Lz} – проекция орбитального магнитного момента, m – магнитное квантовое число, $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9,27 \cdot 10^{-26}$ Дж/Тл – магнетон Бора;

$$M_{Sz} = -2\mu_B m_s,$$

где M_{Sz} – проекция спинового магнитного момента, $m_s = \pm \frac{1}{2}$ – магнитное спиновое число.

Правила квантования полного магнитного момента:

$$M_z = -(m + 2m_s)\mu_B, \text{ если состояние задано как } |n, l, m, m_s\rangle;$$

$$M_z = -\mu_B g m_j, \text{ если состояние задано как } |n, l, j, m_j\rangle,$$

где m_j – магнитное квантовое число полного момента, $m_j = -j, -j+1, \dots, j$

, j – квантовое число полного момента;

при $l=0$ $j = s = 1/2$; при $l > 0$ $j = l \pm 1/2$;

g – множитель (или фактор) Ланде:

$$g = \frac{3}{2} + \frac{s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}.$$

В одновалентных атомах суммарный спин электронов $s = \frac{1}{2}$.

Стационарные состояния атома в магнитном поле получают энергетическую добавку

$$\Delta E = -M_z B;$$

$\Delta E = (m + 2m_s)\mu_B B$ – в сильном магнитном поле (простой эффект Зеемана);

$\Delta E = m_j \mu_B g B$ – в слабом магнитном поле (сложный эффект Зеемана).

Взаимодействие спина с магнитным полем

Спин электрона $s = 1/2$. Два независимых спиновых состояния отличаются проекцией спина на произвольно выбранную ось z . Обозначим эти состояния

$$\begin{aligned} |+\rangle &- m_s = \frac{1}{2}; \\ |-\rangle &- m_s = -\frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Любое другое спиновое состояние является суперпозицией двух этих базисных состояний:

$$|A\rangle = \xi |+\rangle + \eta |-\rangle,$$

где ξ, η – комплексные числа.

Расположим эти коэффициенты по строкам матрицы-столбца

$$|A\rangle = \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix}.$$

Эта матрица называется спинором. Спинор – это вектор в двухмерном комплексном пространстве.

Два спинора

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \xi = 1, \eta = 0$$

и

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \xi = 0, \eta = 1$$

отвечают двум базисным состояниям $|+\rangle$ и $|-\rangle$.

В общем случае, если z – проекция спина точно не определена, коэффициенты ξ, η являются комплексными амплитудами вероятности обнаружить электрон в каждом из базисных состояний, при этом

$$\begin{aligned} P_+ &= |\xi|^2 \text{ – вероятность того, что измерение покажет } S_z = +\frac{\hbar}{2}; \\ P_- &= |\eta|^2 \text{ – вероятность того, что измерение покажет } S_z = -\frac{\hbar}{2}; \end{aligned}$$

$$P_+ + P_- = 1; |\xi|^2 + |\eta|^2 = 1.$$

Базисные состояния являются собственными для оператора проекции спина:

$$\hat{s}_z |+\rangle = \frac{\hbar}{2} |+\rangle; \hat{s}_z |-\rangle = -\frac{\hbar}{2} |-\rangle;$$

в представлении состояний спинорами:

$$\hat{s}_z \begin{pmatrix} \mathbf{1} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \mathbf{1} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}; \hat{s}_z \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{1} \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{1} \end{pmatrix}.$$

В этом представлении оператор проекции спина можно записать в матричном виде

$$\hat{s}_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z,$$

где σ_z – двухрядная матрица

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{1} \end{pmatrix}.$$

Операторы двух других проекций тоже можно представить матрицами:

$$\hat{s}_x = \frac{\hbar}{2} \sigma_x; \hat{s}_y = \frac{\hbar}{2} \sigma_y,$$

где $\sigma_x = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix}; \sigma_y = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & -\mathbf{i} \\ \mathbf{i} & \mathbf{0} \end{pmatrix}.$

Три матрицы σ называются *матрицами Паули*.

Оператор спинового магнитного момента определяется выражением:

$$\hat{M}_s = -2\gamma \hat{s},$$

где $\gamma = \frac{e}{2m_e}$ – гиромагнитное отношение.

В спинорном представлении операторы проекций спинового момента имеют вид:

$$\begin{aligned} \hat{M}_{sz} &= -\mu_B \sigma_z; \\ \hat{M}_{sy} &= -\mu_B \sigma_y; \\ \hat{M}_{sx} &= -\mu_B \sigma_x. \end{aligned}$$

Гамильтониан взаимодействия спина с магнитным полем определяется формулой

$$\hat{H}_S = \hat{M}_s \cdot \hat{B}.$$

6.2. Задачи

6.1. Изобразить схему расщепления d -состояния одновалентного атома в простом эффекте Зеемана. Определить энергетический интервал между соседними подуровнями и кратность вырождения каждого подуровня. Индукция магнитного поля B .

6.2. Вычислить полные механический и магнитный моменты одновалентного атома, находящегося в состоянии ${}^2D_{3/2}$.

6.3. Известно, что энергетический интервал между соседними зеемановскими подуровнями водородоподобного атома, помещённого в магнитное поле напряженностью $H = 10^3$ Гс (сложный эффект Зеемана), равен $\Delta E = 6,18 \cdot 10^{-18}$ эрг. Величина суммарного момента импульса оптического электрона равна $J = 0,909 \cdot 10^{-27}$ г·см²/с. Определить модуль орбитального момента импульса.

6.4 Парамагнитный резонанс наблюдается на атомах, находящихся в состоянии ${}^2D_{5/2}$, помещённых в магнитное поле с индукцией 0,6 Тл. Найти резонансную длину волны.

6.5 Атом, находящийся в состоянии ${}^2F_{5/2}$, помещается в слабое магнитное поле с индукцией B . Найти энергетическую ширину зеемановского спектра (разность между максимальной и минимальной энергиями зеемановских подуровней). Сколько подуровней содержит спектр?

6.6. Найти зеемановское смещение $\Delta\omega$ спектральной линии $2D_{3/2} \rightarrow 2P_{1/2}$. Указать число компонентов в расщепленной линии.

6.7. Найти минимальное значение индукции магнитного поля B_{\min} , при котором спектральным прибором с разрешающей способностью $R = 10^5$ можно разрешить все компоненты спектральной линии $\lambda_0 = 536$ нм при её расщеплении в простом эффекте Зеемана.

6.8. Доказать, что для матриц Паули $\sigma_i (i = 1, 2, 3)$ выполняются следующие соотношения: $\sigma_1\sigma_2 = i\sigma_3$, $\sigma_2\sigma_3 = i\sigma_1$, $\sigma_3\sigma_1 = i\sigma_2$. Обосновать коммутационные соотношения для каждой пары матриц.

6.3. Ответы и решения

6.1. Решение.

В простом эффекте Зеемана приращение энергии:

$$\Delta E = (m + 2m_s)\mu_B B.$$

Расстояние между соседними подуровнями определяется изменением $\Delta m = 1$:

$$\delta E = \mu_B B.$$

Расщепление d -состояния ($l = 2, m = 0, \pm 1, \pm 2$) показано на рис. 6.1.

Три уровня двукратно вырождены.

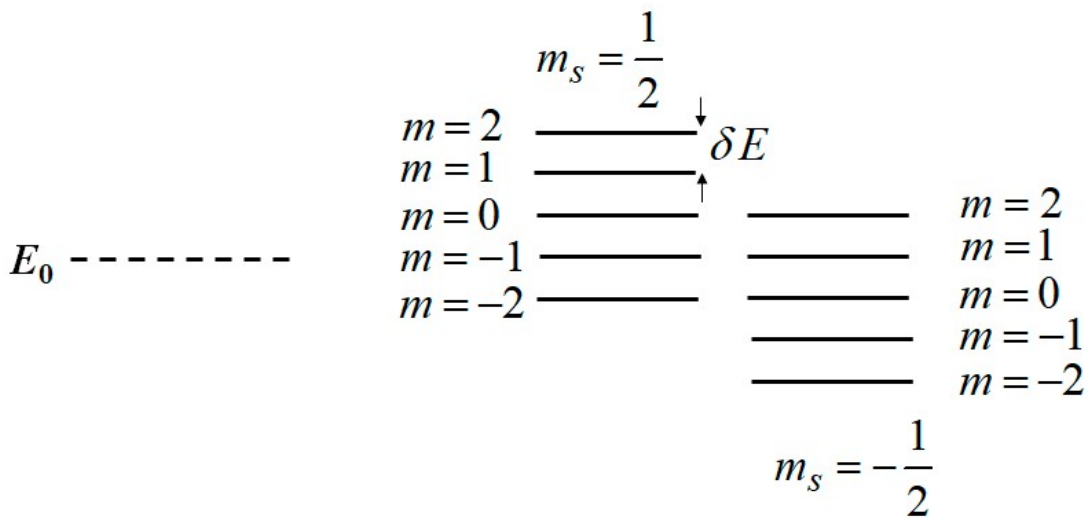


Рис. 6.1. Схема расщепления d -состояния одновалентного атома в простом эффекте Зеемана

6.2. Механический момент $J = \frac{\sqrt{15}}{2}\hbar$; магнитный момент

$$M = \frac{2}{5}\sqrt{15}\mu_B.$$

6.3. $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar = \sqrt{2}\hbar = 1,5 \cdot 10^{-34}$ кг·м²/с.

$$6.4 \lambda = \frac{2\pi c\hbar}{g\mu_B B} \approx 3 \text{ см.}$$

6.5 Решение

Смещение каждого подуровня из начального положения

$$\Delta E_{m_j} = \mu_B g B m_j,$$

где g – фактор Ланде:

$$g = \frac{3}{2} + \frac{s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}.$$

Подстановка $s = \frac{1}{2}$, $l = 3$, $j = \frac{5}{2}$ даёт значение $g = \frac{6}{7}$.

Магнитное квантовое число m_j меняется от $-j$ до j , поэтому

$$\Delta E_{\max} = \mu_B g B j; \quad \Delta E_{\min} = -\mu_B g B j.$$

Интервал энергий, в который укладываются зеемановские подуровни:

$$\Delta E = 2\mu_B g B j = \frac{30}{7} \mu_B B.$$

Число подуровней равно кратности вырождения невозмущённого уровня

$$p = 2j + 1 = 6.$$

6.6. Решение.

Сдвиг энергии состояния в сложном эффекте Зеемана

$$\Delta E = m_j \mu_B g B.$$

Верхний уровень расщепляется в магнитном поле на 4 подуровня с энергиями

$$E_{2m_j} = E_2 + m_j \mu_B g_2 B,$$

где $m_j = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}$.

$$g_2 = \frac{4}{5} \quad (\text{см задачу 6.2}).$$

Интервал между подуровнями

$$\delta E_2 = \mu_B g_2 B = \frac{4}{5} \mu_B B.$$

Нижний уровень расщепляется в магнитном поле на 2 подуровня с энергиями

$$E_{1m_j} = E_1 + m_j \mu_B g_1 B,$$

где

$$m_j = \pm \frac{1}{2}.$$

$$g_1 = \frac{3}{2} + \frac{s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} = \frac{3}{2} + \frac{\frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} - 2}{2 \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2}} = \frac{2}{3}.$$

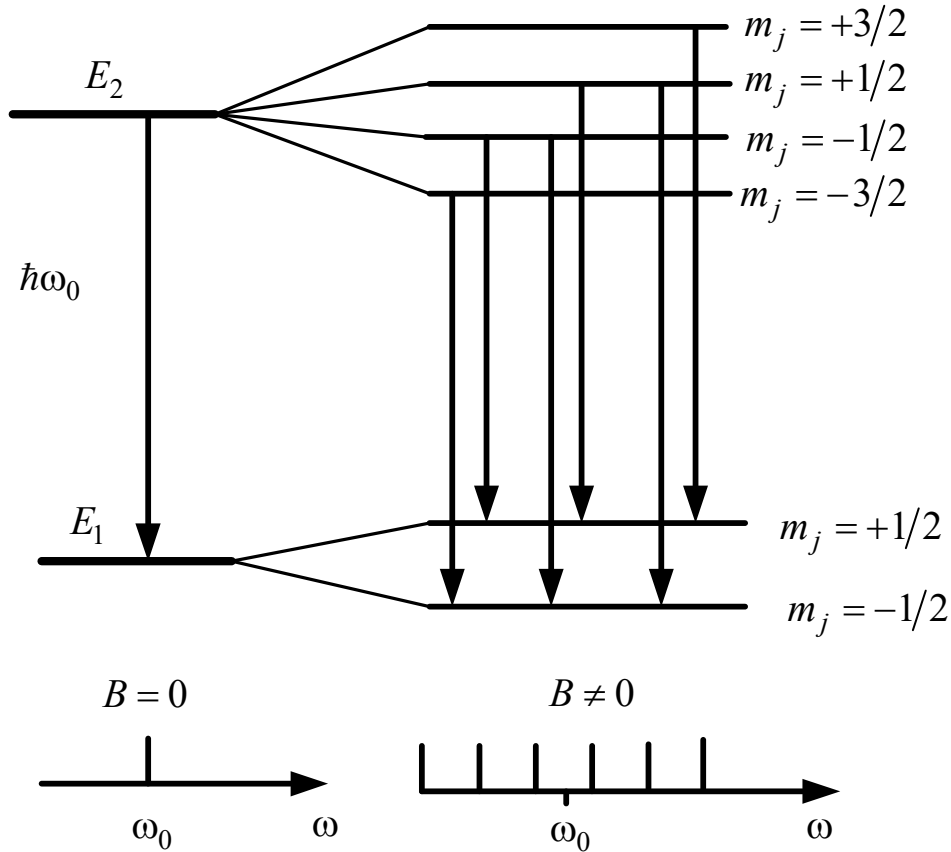


Рис. 6.2. Расщепление спектральной линии в сложном эффекте Зеемана

Интервал между подуровнями

$$\delta E_1 = \mu_B g_1 B = \frac{2}{3} \mu_B B.$$

Правило отбора для дипольных переходов:

$$\Delta m_j = 0, \pm 1.$$

Образуются 6 спектральных линий со следующими сдвигами частот относительно ω_0 (см. рис. 6.2):

$$\Delta\omega = \left(g_2 m_j^{(2)} - g_1 m_j^{(1)} \right) \frac{\mu_B B}{\hbar} = \left(\pm \frac{13}{15}, \pm \frac{11}{15}, \pm \frac{1}{15} \right) \frac{\mu_B B}{\hbar}$$

$$\left(m_j^{(2)} - m_j^{(1)} = 0, \pm 1 \right).$$

6.7. Решение.

Разрешающая способность

$$R = \frac{\lambda_0}{\delta\lambda_{\min}},$$

где $\delta\lambda_{\min}$ – минимальная разность длин волн, разрешимых на приборе.

Тогда

$$\delta\lambda_{\min} = \frac{\lambda_0}{R}.$$

Расщепление спектральных линий обусловлено расщеплением энергетических уровней атома. Энергетический интервал между зеемановскими подуровнями в простом эффекте Зеемана

$$\delta E = \mu_B B.$$

Частотный интервал между линиями спектра

$$\delta\omega = \frac{\delta E}{\hbar} = \frac{\mu_B B}{\hbar}.$$

Связь частоты и длины волны следующая:

$$\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}.$$

Если $\delta\lambda \ll \lambda = \lambda_0$, то

$$\delta\omega = \left| \frac{d\omega}{d\lambda} \right| \delta\lambda = \frac{2\pi c}{\lambda^2} \delta\lambda.$$

Приравнивая два выражения для $\delta\omega$ и учитывая, что $\lambda = \lambda_0$, получим

$$\begin{aligned} \frac{\mu_B B}{\hbar} &= \frac{2\pi c}{\lambda^2} \delta\lambda, \\ \delta\lambda &= \frac{\mu_B B \lambda_0^2}{2\pi c \hbar}. \end{aligned}$$

Для того, чтобы спектральные компоненты были разрешимы, необходимо, чтобы выполнялось условие

$$\delta\lambda \geq \delta\lambda_{\min} = \frac{\lambda_0}{R}.$$

Это равнозначно условию

$$\frac{\mu_B B \lambda_0^2}{2\pi c \hbar} \geq \frac{\lambda_0}{R}.$$

Следовательно,

$$B \geq B_{\min} = \frac{2\pi c \hbar}{\mu_B \lambda_0 R} = \frac{ch}{\mu_B \lambda_0 R};$$

$$B_{\min} = \frac{3 \cdot 10^8 \cdot 6,6 \cdot 10^{-34}}{9,3 \cdot 10^{-24} \cdot 5,4 \cdot 10^{-7} \cdot 10^5} = 0,39 \text{ Тл.}$$

6.8. Раскрывая коммутаторы и подставляя матрицы Паули, получим следующее: $[\sigma_1, \sigma_2] = \sigma_1 \sigma_2 - \sigma_2 \sigma_1 = 2i\sigma_3$;
 $[\sigma_2, \sigma_3] = \sigma_2 \sigma_3 - \sigma_3 \sigma_2 = 2i\sigma_1$; $[\sigma_3, \sigma_1] = \sigma_3 \sigma_1 - \sigma_1 \sigma_3 = 2i\sigma_2$.

7. ЭВОЛЮЦИЯ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ ВО ВРЕМЕНИ

7.1. Основные понятия и формулы

Эволюция квантового состояния во времени изображается полным (временным) уравнением Шрёдингера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi .$$

Если гамильтониан не зависит явно от времени, то уравнение допускает решение, отвечающее стационарному состоянию

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \psi(\mathbf{r}) = e^{-i\omega t} \psi(\mathbf{r}),$$

где E – энергия стационарного состояния, ω – частота волны де Бройля, $\psi(\mathbf{r})$ – стационарная волновая функция, подчиняющаяся уравнению

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

Если состояние, занимаемое квантовой системой, не является стационарным, то средние значения наблюдаемых величин изменяются во времени. Скорость изменения среднего значения наблюдаемой Q

$$\frac{d\langle Q \rangle}{dt} = \langle \hat{Q} \rangle$$

где \hat{Q} – оператор производной:

$$\hat{Q} = \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{Q}] .$$

Если классическая наблюдаемая Q не зависит явно от времени, то её оператор определяется выражением

$$\hat{Q} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{Q}] .$$

В представлении Гейзенберга зависимость от времени с волновых функций и векторов состояния переносится на операторы:

$$\hat{Q} \rightarrow \hat{Q}(t) .$$

Гейзенберговы операторы подчиняются «уравнениям движения»

$$\frac{d\hat{Q}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{Q}(t)] .$$

7.2. Задачи

7.1. Волновая функция электрона в начальный момент времени $t = 0$ имеет вид $\Psi(x, 0) = A \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right)$ (волновой пакет). Определить нормировочный коэффициент A . Найти закон изменения во времени волновой функции и плотности вероятности $\rho(x)$.

7.2. Электрон в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной l в начальный момент времени $t = 0$ находится в суперпозиции двух стационарных состояний $\Psi(x, 0) = A [\psi_1(x) + \psi_2(x)]$, где $n_1 = 1$ и $n_2 = 2$ с энергиями E_1 и E_2 . Необходимо

а) провести нормировку функции $\Psi(x, 0)$. Указание – функции стационарных состояний ортогональны;

б) найти зависимость от времени волновой функции и квадрата её модуля $\Psi(x, t)$ и $|\Psi(x, t)|^2$.

в) рассчитать зависимость от времени средней координаты электрона $\langle x \rangle$. Заметьте, что эта величина осциллирует во времени. Указать частоту и амплитуду этих осцилляций.

7.3. Гармонический осциллятор массы m и частоты ω в начальный момент времени $t = 0$ приводится в состояние суперпозиции основного и первого возбуждённого стационарных уровней: $|S\rangle_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}}|1\rangle$.

Как изменяется вектор состояния $|S\rangle$ во времени? Найти зависимость от времени средних значений координаты x и проекции импульса p_x .

7.4. Частица массы m движется в потенциальном поле $U(\vec{r})$. Показать, что средние значения координаты и импульса частицы изменяются в соответствии с соотношениями (теорема Эренфеста)

$$\frac{d\langle \vec{r} \rangle}{dt} = \frac{\langle \vec{p} \rangle}{m} \quad \text{и} \quad \frac{d\langle \vec{p} \rangle}{dt} = \langle \vec{F} \rangle = -\left\langle \vec{\text{grad}} U \right\rangle.$$

7.5. Частица массы m находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной l с абсолютно непроницаемыми стенками ($0 \leq x \leq l$). В начальный момент времени $t = 0$ волновая функция частицы

имеет вид $\Psi(x, 0) = A \sin^3\left(\frac{\pi x}{l}\right)$. Через какое минимальное время частица возвращается в исходное состояние?

7.6. Двухуровневый атом находится в поле монохроматической волны, частота которой в точности совпадает с резонансной частотой перехода между двумя уровнями $\omega_0 = (E_2 - E_1)/\hbar$, где E_1 и E_2 – энергия основного и возбуждённого состояний (заселение энергетических уровней, не относящихся к резонансной паре, практически исключено). Амплитуда колебаний электрического вектора волны равна E_0 . Матричный элемент дипольного момента между резонансными состояниями задан. Считая резонансные уровни невырожденными, найти зависимость от времени вероятности их заселения.

7.7. Электрон находится в стационарном состоянии, в котором проекция его спина на ось z точно определена и равна $+\hbar/2$. В некоторый момент времени электрон помещают в постоянное магнитное поле с индукцией B , ориентированной вдоль оси x . Найти вероятность переворота спина за время t .

7.8. Используя уравнения движения для гейзенберговских операторов, связать операторы координаты и импульса в представлении Гейзенберга с теми же операторами в представлении Шрёдингера для линейного гармонического осциллятора массы m и частоты ω .

7.3. Ответы и решения

7.1. Решение.

Распределение вероятности в начальный момент времени является гауссовым:

$$\rho(x, 0) = |\Psi(x, 0)|^2 = |A|^2 \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right).$$

Условие нормировки следующее:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx = 1.$$

Формула для интегрирования

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\beta}}.$$

Эта формула справедлива и для комплексных значений множителя β при условии $\text{Re } \beta > 0$.

$$|A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right) dx = \sqrt{\pi a^2} = \sqrt{\pi} a.$$

Отсюда заключаем, что $A = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} a}}$.

Состояние, изображаемое функцией $\Psi(x, 0)$, не является стационарным, поскольку не удовлетворяет стационарному уравнению Шрёдингера для свободной частицы. С течением времени состояние самопроизвольно изменяется.

Волновой пакет представляем как суперпозицию плоских волн де Бройля, распространяющихся вдоль x :

$$\Psi(x, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(k) e^{ikx} \frac{dk}{2\pi}.$$

Такое представление функции от координаты x называется преобразованием (интегралом) Фурье. Каждой плоской волне, представленной экспоненциальным множителем под интегралом, отвечает состояние движения частицы с заданным импульсом ($p_x = \hbar k$, $p_y = p_z = 0$). Это состояние является стационарным, и ему отвечает энергия

$$E = E_k = \frac{p_x^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Переход от стационарной к полной (временной) волновой функции осуществляется следующей заменой:

$$e^{ikx} \rightarrow e^{i(kx - \omega t)},$$

где $\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}$ – частота волны де Бройля.

Зависимость от времени волновой функции состояния, представленного начальным распределением $\Psi(x, 0)$, получается из формулы

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(k) \exp\left(-i \frac{\hbar k^2}{2m} t\right) e^{ikx} \frac{dk}{2\pi}.$$

Функцию φ найдем из обратного преобразования Фурье

$$\begin{aligned}\varphi(k) &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, 0) \exp\{ikx\} dx = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}a}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{1}{2a^2}(x^2 + 2ika^2x - k^2a^4) - \frac{k^2a^2}{2}\right\} dx\end{aligned}$$

или

$$\varphi(k) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}a}} \exp\left(-\frac{k^2a^2}{2}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{1}{2a^2}(x + ika^2)^2\right\} dx,$$

откуда

$$\varphi(k) = \sqrt{2\sqrt{\pi}a} \exp\left(-\frac{k^2a^2}{2}\right).$$

Тогда

$$\Psi(x, t) = \sqrt{2\sqrt{\pi}a} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{k^2a^2}{2}\right) \exp\left(-i\frac{\hbar k^2}{2m}t\right) e^{ikx} \frac{dk}{2\pi}$$

или

$$\Psi(x, t) = \sqrt{2\sqrt{\pi}a} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{k^2}{2}\left(a^2 + i\frac{\hbar}{m}t\right)\right) e^{ikx} \frac{dk}{2\pi}.$$

При $t = 0$

$$\Psi(x, 0) = \sqrt{2\sqrt{\pi}a} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{k^2a^2}{2}\right) e^{ikx} \frac{dk}{2\pi} = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}a}} \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right),$$

где

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{k^2a^2}{2}\right) e^{ikx} \frac{dk}{2\pi} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}a} \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right).$$

Проводя замену $a^2 \rightarrow a^2 + i\frac{\hbar}{m}t$, находим

$$\begin{aligned}& \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{k^2}{2}\left(a^2 + i\frac{\hbar}{m}t\right)\right) e^{ikx} \frac{dk}{2\pi} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\left(a^2 + i\frac{\hbar}{m}t\right)}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\left(a^2 + i\frac{\hbar}{m}t\right)}\right).\end{aligned}$$

Тогда плотность вероятности:

$$\begin{aligned} \rho(x, t) = \Psi^* \Psi &= \frac{a}{\sqrt{\pi \left(a^2 + \frac{\hbar^2}{m^2 a^2} t^2 \right)}} \exp \left\{ -\frac{x^2}{2} \left(\frac{1}{a^2 + i \frac{\hbar}{m} t} + \frac{1}{a^2 - i \frac{\hbar}{m} t} \right) \right\} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi \left(a^2 + \frac{\hbar^2}{m^2 a^2} t^2 \right)}} \exp \left\{ -\frac{x^2 a^2}{\left(a^4 + \frac{\hbar^2}{m^2} t^2 \right)} \right\} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi \left(a^2 + \frac{\hbar^2}{m^2 a^2} t^2 \right)}} \exp \left\{ -\frac{x^2}{\left(a^2 + \frac{\hbar^2}{m^2 a^2} t^2 \right)} \right\}. \end{aligned}$$

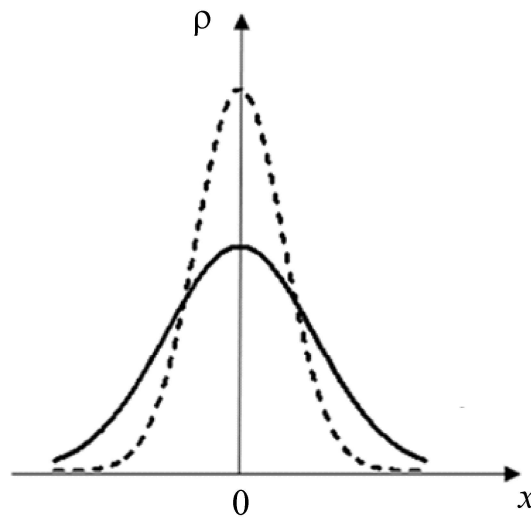


Рис. 7.1. Расплывание волнового пакета

Представим эту формулу в компактной форме

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi \Delta(t)}} \exp \left\{ -\frac{x^2}{\Delta^2(t)} \right\}.$$

Эта формула описывает нормальное распределение вероятности, ширина которого увеличивается во времени, т.е. происходит расплывание волнового пакета

$$\Delta(t) = \sqrt{a^2 + \frac{\hbar^2}{m^2 a^2} t^2}.$$

Чем меньше начальная ширина пакета a , тем быстрее он расплывается (см. рис. 7.1).

7.2. 1) Нормировочный множитель $A = \frac{1}{\sqrt{2}}$;

2) зависимость от времени волновой функции и квадрата её модуля $\Psi(x, t)$ и $|\Psi(x, t)|^2$:

$$\Psi(x, t) = A(\Psi_1(x, t) + \Psi_2(x, t)) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1(x)e^{-i\omega_1 t} + \psi_2(x)e^{-i\omega_2 t});$$

$$\rho(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 = \frac{1}{l} \left[1 - \frac{1}{2} \cos\left(\frac{2\pi}{l}x\right) - \frac{1}{2} \cos\left(\frac{4\pi}{l}x\right) + \right. \\ \left. + \cos\left(\frac{\pi}{l}x\right) \cos(\omega t) - \cos\left(\frac{3\pi}{l}x\right) \cos(\omega t) \right];$$

3) $\langle x \rangle = \left[\frac{l}{2} - \frac{16l}{9\pi^2} \cos(\omega t) \right]$; среднее значение координаты испытывает

гармонические колебания вокруг центра ямы ($l/2$) на частоте $\omega = \frac{3\pi^2 \hbar}{2ml^2}$;

амплитуда колебаний $x_0 = \frac{16l}{9\pi^2} < \frac{l}{2}$.

7.3. Решение.

Изменение во времени вектора стационарного состояния

$$|n\rangle_t = |n\rangle \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right),$$

где E_n – энергия состояния.

Энергия осциллятора определяется формулой

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right).$$

Зависимость от времени вектора суперпозиции определяется выражением

$$|S\rangle_t = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle e^{-i\omega_0 t} - \frac{i}{\sqrt{2}}|1\rangle e^{-i\omega_1 t},$$

где

$$\omega_0 = \frac{E_0}{\hbar} = \frac{\omega}{2}, \quad \omega_1 = \frac{E_1}{\hbar} = \frac{3\omega}{2}.$$

Среднее значение координаты

$$\langle x \rangle = \langle S | \hat{x} | S \rangle.$$

Воспользуемся лестничными операторами

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} + i \sqrt{\frac{1}{m\omega\hbar}} \hat{p}_x \right)$$

и

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} - i \sqrt{\frac{1}{m\omega\hbar}} \hat{p}_x \right).$$

Выражаем операторы координаты и импульса через лестничные операторы:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^+),$$

$$\hat{p}_x = -i \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^+).$$

Вычисляем среднее значение координаты

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \langle S | \hat{x} | S \rangle = \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\omega_0 t} \langle 0 | + \frac{i}{\sqrt{2}} e^{i\omega_1 t} \langle 1 | \right) \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \times \\ &\times (\hat{a} + \hat{a}^+) \left(\frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle e^{-i\omega_0 t} - \frac{i}{\sqrt{2}} |1\rangle e^{-i\omega_1 t} \right) = \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\omega_0 t} \langle 0 | + \frac{i}{\sqrt{2}} e^{i\omega_1 t} \langle 1 | \right) \times \\ &\times \left(\frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle e^{-i\omega_0 t} - \frac{i}{\sqrt{2}} |0\rangle e^{-i\omega_1 t} - \frac{i}{\sqrt{2}} \sqrt{2} |2\rangle e^{-i\omega_1 t} \right). \end{aligned}$$

Воспользовавшись условиями ортонормированности базисных векторов

$$\langle m | n \rangle = \delta_{mn}, \quad \langle 0 | 0 \rangle = \langle 1 | 1 \rangle = 1, \quad \langle 0 | 1 \rangle = \langle 1 | 0 \rangle = 0,$$

получим

$$\langle x \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(-\frac{i}{2} e^{-(\omega_1 - \omega_0)t} + \frac{i}{2} e^{i(\omega_1 - \omega_0)t} \right).$$

Воспользовавшись формулой Эйлера, с учетом равенства $\omega_1 - \omega_0 = \omega$ получим

$$\langle x \rangle = -\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sin \omega t.$$

Аналогично находим среднее значение проекции $\langle p_x \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle p_x \rangle &= \langle S | \hat{p}_x | S \rangle = \\ &= -i \left(\frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\omega_0 t} \langle 0 | + \frac{i}{\sqrt{2}} e^{i\omega_1 t} \langle 1 | \right) \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} \times \\ &\times \left(\hat{a} - \hat{a}^+ \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle e^{-i\omega_0 t} - \frac{i}{\sqrt{2}} |1\rangle e^{-i\omega_1 t} \right) = \\ &= -i \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\omega_0 t} \langle 0 | + \frac{i}{\sqrt{2}} e^{i\omega_1 t} \langle 1 | \right) \times \\ &\times \left(-\frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle e^{-i\omega_0 t} - \frac{i}{\sqrt{2}} |0\rangle e^{-i\omega_1 t} + \frac{i}{\sqrt{2}} \sqrt{2} |2\rangle e^{-i\omega_1 t} \right) = \\ &= -i \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} \left(-\frac{i}{2} e^{-i(\omega_1 - \omega_0)t} - \frac{i}{2} e^{i(\omega_1 - \omega_0)t} \right). \end{aligned}$$

Окончательно получим

$$\langle p_x \rangle = -\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} \cos \omega t.$$

7.4. Для доказательства используйте операторы производной координат и импульса.

7.5. Решение.

Используя тригонометрическое выражение

$$\sin^3 \varphi = \frac{1}{4} (3 \sin \varphi - \sin 3\varphi),$$

представим начальную волновую функцию в виде

$$\Psi(x, 0) = \frac{A}{4} \left[3 \sin\left(\frac{\pi x}{l}\right) - \sin\left(\frac{3\pi x}{l}\right) \right].$$

Эта функция изображает суперпозицию основного и второго возбуждённого стационарных состояний ($n_1 = 1$, $n_2 = 3$) частицы в яме:

$$\Psi(x, 0) = \frac{A\sqrt{l}}{4} [3\psi_1(x) - \psi_3(x)].$$

С течением времени волновые функции стационарных состояний изменяются по закону

$$\Psi_n(x, t) = e^{-i\omega_n t} \psi_n(x),$$

где $\omega_n = \frac{E_n}{\hbar} = \frac{\hbar\pi^2}{2ml^2}n^2$, E_n – энергия n -го состояния.

Зависимость от времени ψ -функции состояния суперпозиции следующая:

$$\Psi(x, t) = \frac{A\sqrt{l}}{4} [3e^{-i\omega_1 t} \psi_1(x) - e^{-i\omega_3 t} \psi_3(x)] = \frac{A\sqrt{l}}{4} [3e^{-i\omega_1 t} \psi_1(x) - e^{-9i\omega_1 t} \psi_3(x)].$$

Гармонические функции, входящие в суперпозицию, имеют общий период

$$T = T_1 = \frac{2\pi}{\omega_1} = \frac{4ml^2}{\pi\hbar}.$$

Этот период и является искомым временем возврата системы в исходное состояние.

7.6. Решение.

Оператор потенциальной энергии атома в электромагнитном поле в дипольном приближении

$$\hat{V} = -\vec{E} \cdot \hat{d}.$$

При условии, что размер атома мал по сравнению с длиной волны, фазу колебаний волны можно считать постоянной по объёму атома:

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \cos(\omega t),$$

где ω – частота волны, \hat{d} – оператор дипольного момента.

$$\hat{V} = -(\vec{E}_0 \cdot \hat{d}) \cos \omega t = -\frac{1}{2}(\vec{E}_0 \cdot \hat{d})(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}).$$

Волновая функция атома подчиняется нестационарному уравнению Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{V})\Psi.$$

Рассматриваем нестационарное состояние атома в переменном поле как суперпозицию невозмущённых стационарных состояний

$$\Psi(\vec{r}, t) = a_1(t) \exp(-i \frac{E_1}{\hbar} t) \psi_1(\vec{r}) + a_2(t) \exp(-i \frac{E_2}{\hbar} t) \psi_2(\vec{r}),$$

где ψ_1 и ψ_2 – стационарные волновые функции невозмущённых состояний (в дальнейшем зависимость от координат будем опускать):

$$\hat{H}_0 \psi_{1,2} = E_{1,2} \psi_{1,2}.$$

Квадраты модулей коэффициентов $a_{1,2}$ определяют вероятность обнаружения атома в соответствующем стационарном состоянии:

$$P_{1,2} = |a_{1,2}|^2, \quad |a_1|^2 + |a_2|^2 = 1.$$

Подстановка разложения в уравнение Шрёдингера приводит к уравнению

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{d a_1}{dt} \exp(-i \frac{E_1}{\hbar} t) \psi_1 - i\hbar \frac{d a_2}{dt} \exp(-i \frac{E_2}{\hbar} t) \psi_2 = \\ = a_1 \exp(-i \frac{E_1}{\hbar} t) \hat{V} \psi_1 + a_2 \exp(-i \frac{E_2}{\hbar} t) \hat{V} \psi_2. \end{aligned}$$

Воспользовавшись ортогональностью волновых функций, можно получить

$$-i\hbar \frac{d a_1}{dt} = a_1 V_{11} + a_2 \exp(-i\omega_0 t) V_{12},$$

где $\omega_0 = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$ – резонансная частота перехода;

$V_{ij} = -\frac{1}{2} (\vec{E}_0 \cdot \vec{d}_{ij}) (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})$ – матричный элемент возмущения.

Диагональные матричные элементы дипольного момента обращаются в 0, поэтому

$$i\hbar \frac{d a_1}{dt} = \frac{1}{2} (\vec{E}_0 \cdot \vec{d}_{12}) \left(e^{i(\omega - \omega_0)t} + e^{-i(\omega + \omega_0)t} \right) a_2.$$

При точном совпадении частот ($\omega_0 = \omega$) первое слагаемое в скобках обращается в 1, а второе изображает быстро осциллирующий процесс, исчезающий при усреднении по времени. Уравнение приобретает вид

$$i\hbar \frac{d a_1}{dt} = \frac{1}{2} (\vec{E}_0 \cdot \vec{d}_{12}) a_2.$$

Аналогичное уравнение для второго коэффициента

$$i\hbar \frac{d a_2}{dt} = \frac{1}{2} (\vec{E}_0 \cdot \vec{d}_{21}) a_1,$$

здесь $\vec{d}_{21} = \vec{d}_{12}^*$.

Дифференцируя первое соотношение по времени, получаем замкнутое уравнение для a_1 :

$$-\hbar^2 \frac{d^2 a_1}{dt^2} = \frac{1}{4} |\vec{E}_0 \cdot \vec{d}_{12}|^2 a_1$$

или

$$\frac{d^2 a_1}{dt^2} = -\left(\frac{\Omega_P}{2} \right)^2 a_1,$$

здесь $\Omega_P = \frac{|\vec{E}_0 \cdot \vec{d}_{12}|}{\hbar}$ – частота Раби.

Частота Раби зависит от ориентации атома. Если предположить, что дипольный момент ориентируется вдоль вектора напряжённости, то

$$\Omega_P = E_0 |d_{12}|.$$

Решение дифференциального уравнения следующее:

$$a_1 = \cos\left(\frac{\Omega_P t}{2} + \varphi_0\right);$$

$$a_2 = \frac{|d_{12}|}{d_{12}} \sin\left(\frac{\Omega_P t}{2} + \varphi_0\right).$$

Начальная фаза φ_0 определяется из начальных условий. Если, например, в момент времени $t = 0$ атом занимает основное состояние ($a_1 = 1, a_2 = 0$), то $\varphi_0 = 0$.

Тогда вероятности изменяются по гармоническому закону

$$P_1 = \cos^2\left(\frac{\Omega_P t}{2}\right) = \frac{1}{2}(1 + \cos(\Omega_P t));$$

$$P_2 = \sin^2\left(\frac{\Omega_P t}{2}\right) = \frac{1}{2}(1 - \cos(\Omega_P t)).$$

Вероятности заселения резонансных состояний осциллируют на частоте Раби.

7.7. Вероятность переворота спина

$$P_- = \sin^2(\omega_L t),$$

$$\omega_L = \frac{e}{2m_e} B \text{ – частота Лармора.}$$

7.8. Решение.

Обозначим через $\hat{x}(t)$ и $\hat{p}_x(t)$ гейзенберговы операторы координаты и импульса. Те же символы без указания функциональной зависимости от времени будут обозначать операторы в представлении Шрёдингера.

Гамильтониан осциллятора в представлении Гейзенберга

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2(t)}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2(t)}{2}.$$

Уравнения эволюции операторов

$$\frac{d\hat{x}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}(t)];$$

$$\frac{d\hat{p}_x(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{p}_x(t)].$$

Правила коммутации операторов такие же, как и в представлении Шрёдингера:

$$[\hat{x}(t), \hat{p}_x(t)] = i\hbar;$$

$$\frac{d\hat{x}(t)}{dt} = \frac{i}{2m\hbar} [\hat{p}_x^2, \hat{x}(t)] = \frac{i}{2m\hbar} \hat{p}_x [\hat{p}_x, \hat{x}(t)] + \frac{i}{2m\hbar} [\hat{p}_x, \hat{x}(t)] \hat{p}_x.$$

Из основного коммутационного соотношения следует

$$\frac{d\hat{x}(t)}{dt} = \frac{\hat{p}_x}{m}.$$

Точно так же

$$\frac{d\hat{p}_x(t)}{dt} = -m\omega^2 \hat{x}(t).$$

Дифференцируем первое уравнение по времени:

$$\frac{d^2 \hat{x}(t)}{dt^2} = \frac{1}{m} \frac{d\hat{p}_x(t)}{dt} = -\omega^2 \hat{x}(t).$$

Отсюда

$$\hat{x}(t) = \hat{Q}_1 \cos \omega t + \hat{Q}_2 \sin \omega t,$$

$$\hat{p}_x(t) = -m\omega \hat{Q}_1 \sin \omega t + m\omega \hat{Q}_2 \cos \omega t,$$

где \hat{Q}_1, \hat{Q}_2 – два не зависящих от времени (шрёдингеровских) оператора, которые можно найти из начальных условий. Полагая, что в начальный момент времени гейзенберговы операторы совпадают со шрёдингеровскими:

$$\hat{x}(0) = \hat{x}, \quad \hat{p}_x(0) = \hat{p}_x,$$

находим $\hat{Q}_1 = \hat{x}; \quad \hat{Q}_2 = \frac{\hat{p}_x}{m\omega}.$

Следовательно,

$$\hat{x}(t) = \hat{x} \cos \omega t + \frac{\hat{p}_x}{m\omega} \sin \omega t;$$

$$\hat{p}_x(t) = \hat{p}_x \cos \omega t - m\omega \hat{x} \sin \omega t.$$

8. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ. КВАНТОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ

8.1. Основные понятия и формулы

Теория возмущений – приближённый метод решения квантовых задач, применяемый в том случае, когда в условиях задачи можно выделить малые величины (поправки), в пренебрежении которыми возможно точное решение.

В классической системе действие возмущения приводит к малому изменению энергии

$$E = E_0 + V,$$

где E_0 – энергия невозмущенной системы, V – малая поправка энергии, вызванная возмущением.

В квантовой механике дополнительная поправка вносится в гамильтониан

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

где \hat{V} – малая поправка (возмущение) к «невозмущённому» гамильтониану \hat{H}_0 .

Предполагается, что собственные состояния и собственные значения оператора \hat{H}_0 , образующие дискретный спектр, известны:

$$\hat{H}_0 |m\rangle = E_m^{(0)} |m\rangle.$$

Если возмущение V не зависит от времени, то система допускает стационарное решение:

$$\hat{H} |A\rangle = E |A\rangle$$

или

$$(\hat{H}_0 + \hat{V}) |A\rangle = E |A\rangle,$$

где E – энергия возмущённого стационарного состояния $|A\rangle$.

Энергия возмущённой системы определяется методом последовательных приближений:

$$E = E^{(0)} + E^{(1)} + E^{(2)} + \dots,$$

где каждое последующее слагаемое ряда по модулю много меньше предыдущего.

Если энергетический уровень не вырожден, то поправка к энергии уровня в первом порядке теории возмущений равна среднему значению возмущения по невозмущённому состоянию:

$$E_n^{(1)} = \langle V \rangle_n = \langle n | \hat{V} | n \rangle.$$

Длительное действие возмущения может привести к переходам между состояниями невозмущенного спектра. Вероятность перехода определяется матричным элементом оператора возмущения

$$V_{nm} = \langle n | \hat{V} | m \rangle.$$

Вероятность перехода $|i\rangle \rightarrow |n\rangle$ в первом порядке теории возмущений

$$P_{in} = \frac{|V_{ni}|^2}{(E_i^{(0)} - E_n^{(0)})^2}.$$

Если возмущаемый уровень энергии вырожден, то действие возмущения сначала приводит к преформированию независимых квантовых состояний, принадлежащих этому уровню, затем энергия каждого состояния тем или иным образом меняется.

Волновые функции трансформированных состояний определяются по принципу суперпозиции:

$$|\Psi\rangle = \sum_{j=1}^s c_j |n_j\rangle.$$

Число слагаемых в сумме равно кратности вырождения уровня, которому принадлежат s состояний $|n_j\rangle$.

Коэффициенты c_j определяются из системы, содержащей s линейных уравнений

$$\sum_{j=1}^s (E^{(1)} \delta_{ij} - V_{n_i, n_j}) c_j = 0,$$

где $E^{(1)}$ – поправка к энергии уровня первого порядка малости, δ_{ij} – символ Кронекера.

Система линейных однородных уравнений имеет нетривиальные решения только в том случае, если определитель матрицы системы обращается в 0:

$$\|E^{(1)} \delta_{ij} - V_{n_i, n_j}\| = 0.$$

Раскрытие определителя приводит к алгебраическому уравнению для определения энергетической поправки $E^{(1)}$, называемому *секулярным* или *вековым* уравнением.

Секулярное уравнение – степенное уравнение s -го порядка, имеющее не более, чем s различных корней. Каждому набору коэффициентов c отвечает своё значение энергетической поправки. Таким образом, возмущение снимает вырождение уровня. Если все корни секулярного уравнения различны, то вырождение снимается полностью. Если среди корней встречаются кратные, то соответствующие подуровни энергии остаются вырожденными.

Нестационарное (зависящее от времени) возмущение приводит к квантовым переходам между состояниями энергетического спектра.

Если в начальный момент времени $t = 0$ система находится в состоянии $|i\rangle$, то вероятность перехода за время t в состояние $|n\rangle$ в первом порядке теории возмущений, равна

$$P_{in} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i\omega_{ni}t} \cdot V_{ni}(t) \cdot dt \right|^2,$$

где $\omega_{ni} = \frac{E_n - E_i}{\hbar}$ – резонансная частота перехода.

8.2. Задачи

8.1. На частицу массой m , находящуюся в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной l , наложено малое возмущение $\hat{V}(x) = V_0 \cos\left(\frac{\pi x}{l}\right)$. Определить поправки к энергии основного и первого возбуждённого стационарных состояний в первом порядке малости и вероятность перехода между ними в результате длительного воздействия возмущения.

8.2. Для заряженной частицы, находящейся в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме $0 < x < l$ в основном состоянии, найти сдвиги энергетических уровней в однородном электрическом поле с напряжённостью E (направленной вдоль оси x) в первом порядке теории возмущений. Определить вероятность перехода из основного в первое возбуждённое состояние в результате длительного воздействия поля.

8.3. Определить, насколько бы изменилась энергия ионизации атома водорода, если бы к кулоновскому потенциалу взаимодействия электрона

с ядром имелась малая поправка $V = \frac{B}{r^2}$, где B – известная положительная константа.

8.4. Найти уровни энергии ангармонического линейного осциллятора с гамильтонианом $\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \alpha x^3 + \beta x^4$, рассматривая члены $\alpha x^3 + \beta x^4$ как возмущение. Определить вероятность перехода из основного в первое возбуждённое состояние в результате длительного воздействия возмущения.

8.4. В первом порядке теории возмущений определить сдвиг основного энергетического уровня атома водорода, возникающий благодаря влиянию отрицательного иона с элементарным зарядом e , который расположен на расстоянии l от центра ядра атома водорода.

Указание. Взаимодействие с внешним зарядом можно считать слабым возмущением, если расстояние l намного превышает боровский радиус.

8.5. Найти поправку к энергии ионизации атома водорода, если кулоновский потенциал заменить дебаевским, $U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} e^{-\gamma r}$, где γ – положительная константа.

Указание. Дебаевскую поправку можно считать малой, если экспоненциальный множитель в формуле для потенциала мало отличается от единицы в пределах атома $\gamma \ll a^{-1}$, где a – боровский радиус.

8.6. Рассчитать вероятности перехода под действием включившегося постоянного электрического поля E из первого возбуждённого состояния одномерного гармонического осциллятора, обладающего зарядом e , в основное и второе возбуждённое состояния.

8.7. Двукратно вырожденному энергетическому уровню принадлежат независимые состояния, изображаемые волновыми функциями ψ_1 и ψ_2 . Найти расщепление уровня под действием малого стационарного возмущения и волновые функции, отвечающие каждому подуровню. Матричные элементы оператора возмущения по состояниям 1 и 2 известны: $V_{11} = V_{22} = 0$, $V_{12} = V_{21}^* \neq 0$.

8.8. На атом водорода, находившийся при $t = 0$ в основном состоянии, действует переменное однородное электрическое поле $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{-t/\tau}$. Найти в первом порядке теории возмущений вероятность возбуждения атома в 2s- и в 2p-состояния. Волновые функции $\psi_{n,l,m}$

состояний в сферической системе координат: $\psi_{1,0,0}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}}$;

$$\psi_{2,0,0}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{3}{8\pi a^3}} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-\frac{r}{2a}} \cos\theta; \quad \psi_{2,1,0}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a^3}} \frac{r}{a} e^{-\frac{r}{2a}} \cos\theta;$$

$\psi_{2,1\pm 1}(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\sqrt{\pi a^3}} \frac{r}{a} e^{-\frac{r}{2a}} e^{\pm i\varphi} \sin\theta$, где a – радиус первой боровской орбиты.

8.3. Ответы и решения

8.1. Решение.

Нормированные волновые функции стационарных состояний частицы в яме

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{\pi n x}{l}\right).$$

Поправка к энергии n -го состояния

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= \langle n | \hat{V} | n \rangle = \int_0^l \psi_n^*(x) V(x) \psi_n(x) dx = \frac{2}{l} V_0 \int_0^l \cos\left(\frac{\pi x}{l}\right) \sin^2\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx = \\ &= \frac{V_0}{l} \int_0^l \cos\left(\frac{\pi x}{l}\right) \left[1 - \cos\left(\frac{2n\pi x}{l}\right)\right] dx = \\ &= \frac{V_0}{l} \int_0^l \left[\cos\left(\frac{\pi x}{l}\right) - \cos\left(\frac{\pi x}{l}\right) \cos\left(\frac{2n\pi x}{l}\right) \right] dx = \\ &= \frac{V_0}{l} \int_0^l \left[\cos\left(\frac{\pi x}{l}\right) - \frac{1}{2} \cos\left(\frac{(2n-1)\pi x}{l}\right) - \frac{1}{2} \cos\left(\frac{(2n+1)\pi x}{l}\right) \right] dx = \\ &= \frac{V_0}{\pi} \left[\sin\left(\frac{\pi x}{l}\right) - \frac{1}{2(2n-1)} \sin\left(\frac{(2n-1)\pi x}{l}\right) - \right. \end{aligned}$$

$$-\frac{1}{2(2n+1)} \sin\left(\frac{(2n-1)\pi x}{l}\right) \Big|_0^l = 0.$$

Энергия стационарного состояния может изменяться только в высших порядках теории возмущений. Вероятность перехода

$$P_{12} = \frac{|V_{21}|^2}{(E_2^{(0)} - E_1^{(0)})^2} = \frac{1}{(E_2^{(0)} - E_1^{(0)})^2} \left| \int_0^l \psi_2^*(x) V(x) \psi_1(x) dx \right|^2,$$

где

$$\begin{aligned} \int_0^l \psi_2^*(x) V(x) \psi_1(x) dx &= \frac{2}{l} V_0 \int_0^l \sin\left(\frac{2\pi x}{l}\right) \cos\left(\frac{\pi x}{l}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{l}\right) dx = \\ &= \frac{V_0}{l} \int_0^l \sin^2\left(\frac{2\pi x}{l}\right) dx = \frac{V_0}{2l} \int_0^l \left(1 - \cos\left(\frac{4\pi x}{l}\right)\right) dx = \frac{V_0}{2}. \end{aligned}$$

Вероятность перехода

$$P_{12} = \frac{|V_{21}|^2}{(E_2^{(0)} - E_1^{(0)})^2} = \frac{V_0^2}{4(E_2^{(0)} - E_1^{(0)})^2}.$$

Энергия и разность энергий частицы в прямоугольной яме следующие:

$$\begin{aligned} E_n^{(0)} &= \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2, \\ E_2^{(0)} - E_1^{(0)} &= \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2ml^2}; \end{aligned}$$

вероятность перехода между этими уровнями

$$P_{12} = \frac{|V_{21}|^2}{(E_2^{(0)} - E_1^{(0)})^2} = \frac{V_0^2 m^2 l^4}{9\pi^4 \hbar^4}.$$

$$\mathbf{8.2.} \quad P_{12} = \left(\frac{32qE_0 ml^3}{27\pi^4 \hbar^2} \right)^2.$$

8.3. Энергия основного состояния увеличилась, а энергия ионизации

уменьшилась на величину $E^{(1)} = \frac{4B}{a^3} \int_0^\infty e^{-2r/a} dr = \frac{2B}{a^2}.$

$$8.4. E^{(1)} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 l}.$$

$$8.5. \delta E_{\text{ион}} = -\frac{e^2\gamma}{4\pi\epsilon_0}.$$

8.6. Решение.

Представим гамильтониан в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(x),$$

где \hat{H}_0 – гамильтониан гармонического осциллятора, $\hat{V}(x)$ – оператор возмущения.

Стационарные состояния гармонического осциллятора задаются целым числом $n=0, 1, 2, \dots$. Каждому состоянию отвечает энергия

$$E_n^{(0)} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Оператор возмущения

$$\hat{V} = \alpha\hat{x}^3 + \beta\hat{x}^4.$$

Выразим оператор координаты через лестничные операторы (см. задачу 6.3)

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^+).$$

Действуем оператором координаты на вектор состояния:

$$\hat{x}|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n}|n-1\rangle + \sqrt{(n+1)}|n+1\rangle);$$

$$\hat{x}^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} (\sqrt{n(n-1)}|n-2\rangle + (2n+1)|n\rangle + \sqrt{(n+1)(n+2)}|n+2\rangle);$$

$$\hat{x}^3|n\rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{\frac{3}{2}} (\sqrt{n(n-1)(n-2)}|n-3\rangle + 3\sqrt{n^3}|n-1\rangle + 3\sqrt{(n+1)^3}|n+1\rangle + \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}|n+3\rangle);$$

$$\hat{x}^4|n\rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 (\sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)}|n-4\rangle + (4n-2)\sqrt{n(n-1)}|n-2\rangle + (6n^2 + 6n + 3)|n\rangle + (4n+6)\sqrt{(n+1)(n+2)}|n+2\rangle + \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)}|n+4\rangle).$$

Найдём среднее значение куба координаты

$$\langle n | \hat{x}^3 | n \rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\sqrt{n(n-1)(n-2)} \langle n | n-3 \rangle + 3\sqrt{n^3} \langle n | n-1 \rangle + 3\sqrt{(n+1)^3} \langle n | n+1 \rangle + \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)} \langle n | n+3 \rangle \right) = 0,$$

где векторы попарно ортогональны.

Найдём среднее значение четвёртой степени координаты:

$$\langle n | \hat{x}^4 | n \rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 (6n^2 + 6n + 3).$$

Найдём поправку к энергии n -го состояния

$$E_n^{(1)} = \langle \hat{V} \rangle_n = \alpha \langle n | \hat{x}^3 | n \rangle + \beta \langle n | \hat{x}^4 | n \rangle;$$

$$E_n^{(1)} = \beta \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 (6n^2 + 6n + 3).$$

Определим матричные элементы операторов x^3 и x^4 между основным и первым возбуждённым состояниями:

$$\langle 1 | \hat{x}^3 | 0 \rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{\frac{3}{2}} (3\langle 1 | 1 \rangle + \sqrt{6}\langle 1 | 3 \rangle) = 3 \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{\frac{3}{2}},$$

$$\langle 1 | \hat{x}^4 | 0 \rangle = 0.$$

Определим матричный элемент оператора возмущения

$$V_{10} = \alpha \langle 1 | \hat{x}^3 | 0 \rangle = 3\alpha \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{\frac{3}{2}}.$$

Вероятность перехода $1 \rightarrow 0$

$$P_{10} = \frac{|V_{10}|^2}{(E_1^{(0)} - E_0^{(0)})^2}.$$

Поскольку

$$E_1^{(0)} - E_0^{(0)} = \hbar\omega,$$

то вероятность перехода равна

$$P_{10} = \frac{9\hbar\alpha^2}{8m^3\omega^5}.$$

8.7. Решение.

Стационарное уравнение Шрёдингера для возмущённого состояния

$$(\hat{H}_0 + \hat{V})\psi = E\psi,$$

где E – энергия возмущённой системы.

Представим возмущённое состояние как суперпозицию исходных состояний 1 и 2:

$$\begin{aligned}\Psi &= a_1\Psi_1 + a_2\Psi_2; \\ \hat{H}_0\Psi_{1,2} &= E_0\Psi_{1,2}.\end{aligned}$$

Квадраты модулей коэффициентов $a_{1,2}$ определяют вероятность обнаружения системы в одном из независимых начальных состояний 1 или 2:

$$|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1.$$

Подставляем разложение в уравнение Шрёдингера:

$$E_0a_1\Psi_1 + a_1\hat{V}\Psi_1 + E_0a_2\Psi_2 + a_2\hat{V}\Psi_2 = Ea_1\Psi_1 + Ea_2\Psi_2.$$

Воспользовавшись ортогональностью независимых волновых функций, находим два уравнения для a_1 и a_2 ($V_{11} = V_{22} = 0$):

$$\begin{aligned}\delta Ea_1 - V_{12}a_2 &= 0, \\ -V_{21}a_1 + \delta Ea_2 &= 0,\end{aligned}$$

где δE – сдвиг энергии в результате возмущения.

Система линейных однородных уравнений имеет ненулевые решения, если определитель системы обращается в ноль:

$$(\delta E)^2 - |V_{12}|^2 = 0.$$

Два возможных значения энергетического сдвига

$$\delta E = \pm |V_{12}|.$$

Вырожденный энергетический уровень E_0 расщепляется на два близко расположенных подуровня с энергиями

$$E = E_0 + |V_{12}|$$

и

$$E = E_0 - |V_{12}|.$$

Каждому значению δE отвечает свой набор коэффициентов a_1, a_2 :

$$\delta E = +|V_{12}|, \quad a_1 = C, \quad a_2 = C \frac{|V_{12}|}{V_{12}}, \quad \text{где } C \text{ – произвольный множитель.}$$

Для выполнения условия нормировки можно выбрать $C = 1/\sqrt{2}$.

Следовательно, для подуровня $E = E_0 + |V_{12}|$ волновая функция имеет вид $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_1 + \frac{|V_{12}|}{V_{12}} \psi_2 \right)$, для подуровня $E = E_0 - |V_{12}|$ – $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_1 - \frac{|V_{12}|}{V_{12}} \psi_2 \right)$.

8.8. Решение.

Оператор возмущения совпадает с потенциальной энергией электрона во внешнем поле. Если ось z совместить с направлением вектора напряжённости, то

$$\hat{V} = -eE_0 \hat{z} e^{-\frac{t}{\tau}},$$

где e – заряд электрона.

Вероятность перехода за бесконечное время в первом порядке теории возмущений

$$P_{if} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^{\infty} e^{i\omega_{fi}t} \cdot V_{fi}(t) \cdot dt \right|^2,$$

где $V_{fi}(t) = \langle f | \hat{V} | i \rangle$ – матричный элемент возмущения; $|i\rangle = |1, 0, 0\rangle$ – начальное (основное) состояние; под конечным состоянием $|f\rangle$ понимается одно из состояний $|2, 0, 0\rangle$, $|2, 1, 0\rangle$, $|2, 1, \pm 1\rangle$;

$\omega_{fi} = \frac{E_f - E_i}{\hbar} = \frac{8\pi}{3} cR = \omega_0$ – частота перехода в первое возбуждённое состояние; R – постоянная Ридберга.

Матричный элемент возмущения представляем в форме

$$V_{fi}(t) = -eE_0 \langle f | \hat{z} | i \rangle e^{-\frac{t}{\tau}}.$$

После интегрирования по времени для вероятности перехода получим

$$P_{if} = \frac{e^2 E_0^2}{\hbar^2} \left| \frac{1}{\tau^{-1} - i\omega_0} \right|^2 |\langle f | \hat{z} | i \rangle|^2 = \frac{e^2 E_0^2 \tau^2}{\hbar^2 (1 + \omega_0^2 \tau^2)} |\langle f | \hat{z} | i \rangle|^2.$$

Матричный элемент оператора координаты находим через волновые функции:

$$\langle f | \hat{z} | i \rangle = \int \psi_f^* z \psi_i dV.$$

В сферической системе координат $z = r \cos \theta$, $dV = r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi$, где θ и φ – полярный и азимутальный углы.

Если $|f\rangle = |2,0,0\rangle$, то

$$\begin{aligned} \langle f | \hat{z} | i \rangle &= \int \psi_{2,0,0}^* z \psi_{1,0,0} dV = \\ &= \sqrt{\frac{3}{8}} \frac{1}{\pi a^3} \int_0^\infty \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-\frac{3r}{2a}} r^3 dr \int_0^\pi \cos \theta \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = 0, \end{aligned}$$

так как $\int_0^\pi \cos \theta \sin \theta d\theta = 0$.

Переход $1s \rightarrow 2s$ запрещён.

Если $|f\rangle = |2,1,0\rangle$, то

$$\begin{aligned} \langle f | \hat{z} | i \rangle &= \int \psi_{2,1,0}^* z \psi_{1,0,0} dV = \\ &= \frac{1}{4\sqrt{2}\pi a^4} \int_0^\infty e^{-\frac{3r}{2a}} r^4 dr \int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = \frac{2^8}{3^5 \sqrt{2}} a. \end{aligned}$$

Если $|f\rangle = |2,1,\pm 1\rangle$, то

$$\begin{aligned} \langle f | \hat{z} | i \rangle &= \int \psi_{2,1,\pm 1}^* z \psi_{1,0,0} dV = \\ &= \frac{1}{8\pi a^4} \int_0^\infty e^{-\frac{3r}{2a}} r^4 dr \int_0^\pi \cos \theta \sin^2 \theta d\theta \int_0^{2\pi} e^{\mp i\varphi} d\varphi = 0, \end{aligned}$$

так как обнуляется интеграл по φ .

Вероятности перехода

$$\begin{aligned} P_{1s \rightarrow 2s} &= 0; \\ P_{1s \rightarrow 2p} &= \frac{2^{15} e^2 E_0^2 \tau^2 a^2}{3^{10} \hbar^2 (1 + \omega_0^2 \tau^2)}. \end{aligned}$$

9. СТАТИСТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

9.1. Основные понятия и формулы

Распределение Максвелла по скоростям

$$f(v) = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} v^2 \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT} \right),$$

где m – масса частицы газа; $f(v)dv = dP(v)$ – вероятность того, что скорость отдельной молекулы лежит в интервале $(v, v+dv)$.

Наиболее вероятная скорость отвечает максимуму распределения $f(v)$:

$$\left. \frac{df}{dv} \right|_{v=v_{\text{вер}}} = 0;$$
$$v_{\text{вер}} = \sqrt{\frac{2kT}{m}}.$$

Температура вырождения

$$T_{\text{выр}} = \frac{(2\pi\hbar)^2}{3mk} \left(\frac{3n}{4\pi g} \right)^{2/3}.$$

$T \gg T_{\text{выр}}$ – критерий классичности газа;

$T \leq T_{\text{выр}}$ – критерий вырождения газа.

Распределение Бозе-Эйнштейна (для газа бозе-частиц)

$$\langle N_m \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_m - \mu}{kT} \right) - 1},$$

где $\langle N_m \rangle$ – среднее число частиц в состоянии m , μ – химический потенциал; для бозе-газа $\mu \leq 0$; для фотонного газа $\mu = 0$.

Распределение Ферми-Дирака (для газа ферми-частиц)

$$\langle N_m \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_m - \varepsilon_F}{kT} \right) + 1}.$$

В ферми-газе химический потенциал $\mu > 0$ и называется, как правило, энергией или уровнем Ферми:

$$\mu = \varepsilon_F \geq 0;$$

для ферми-газа $\langle N_m \rangle \leq 1$.

Функция распределения электронов по энергии (плотность вероятности по оси энергий)

$$f(E) = \frac{\sqrt{2m^3}}{n\pi^2\hbar^3} \frac{\sqrt{E}}{\exp\left(\frac{E - \varepsilon_F}{kT}\right) + 1},$$

где n – концентрация электронов (показана на рис. 9.1).

При $T = 0$

$$f(E) = \frac{\sqrt{2m^3}}{n\pi^2\hbar^3} \sqrt{E} \text{ при } E < \varepsilon_F,$$

$$f(E) = 0 \text{ при } E > \varepsilon_F.$$

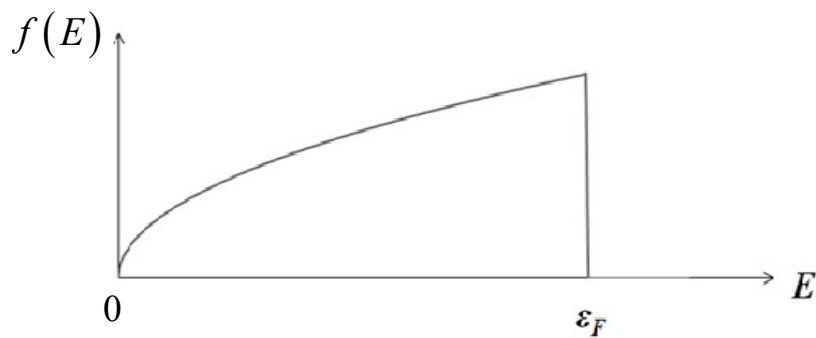


Рис. 9.1. Функция распределения электронов по энергии при $T = 0\text{K}$

Уровень Ферми при $T = 0$

$$\varepsilon_F = \hbar^2 \frac{(3\pi n^2)^{2/3}}{2m}.$$

Температура Ферми

$$T_F = \frac{\varepsilon_F}{k} = \hbar^2 \frac{(3\pi n^2)^{2/3}}{2mk}.$$

Температуру Ферми можно отождествить с температурой вырождения.

9.2. Задачи

9.1. Найти среднее значение величины, обратной скорости молекул максвелловского газа, в состоянии равновесия, то есть $\langle 1/v \rangle$.

9.2. Вычислить наиболее вероятную энергию молекул в идеальном газе. Показать, что эта величина отлична от $\frac{m_0 v_{\text{вер}}^2}{2}$.

9.3. Какая часть молекул газа имеет скорость, большую средней тепловой скорости $v_{\text{ср}} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m_0}}$?

9.4. Определить среднее значение потенциальной энергии одной молекулы в равновесном столбе газа высотой H . Газ находится при температуре T в однородном поле силы тяжести с ускорением g .

9.5. Исходя из функции распределения по энергиям, получить распределение по скоростям для нерелятивистских фермионов с половинным спином. Изобразить график этой функции при абсолютном нуле температуры. Определить среднюю скорость. Определить среднюю энергию и среднеквадратичную скорость.

9.6. Найти долю свободных электронов в металле при 0 К, кинетическая энергия которых больше половины максимальной.

9.7. Показать, исходя из корпускулярных представлений, что для давления равновесного излучения существует следующее простое выражение: $p = u/3$, где u — объёмная плотность энергии излучения.

9.8. Определить полное число фотонов в единице объёма полости, заполненной равновесным тепловым излучением при температуре 300 К.

9.9. Выразить температуру конденсации бозе-газа через плотность частиц и оценить её для изотопа ${}^4_2\text{He}$, если известно, что спин атомов ${}^4_2\text{He}$ равен нулю, а молярный объём составляет $27,6 \text{ см}^3$.

9.3. Ответы и решения

9.1. $\left\langle \frac{1}{v} \right\rangle = 2 \sqrt{\frac{m_0}{2\pi kT}}$.

9.2. Решение.

Переход от функции распределения по скоростям к функции распределения по энергиям следующий:

$$f(v) dv = f(E) dE \text{ при } E = \frac{mv^2}{2};$$

$$f(E) = f(v) \frac{dv}{dE} \text{ при } v = \sqrt{\frac{2E}{m}};$$

$$\frac{dv}{dE} = \frac{1}{\sqrt{2mE}};$$

$$f(E) = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \frac{2E}{m} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \frac{1}{\sqrt{2mE}};$$

$$f(E) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{(kT)^{3/2}} \sqrt{E} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right).$$

Наиболее вероятную энергию находим из условия максимума

$$\frac{df}{dE} = 0;$$

$$\frac{df}{dE} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{(kT)^{3/2}} \left(\frac{1}{2\sqrt{E}} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) - \frac{\sqrt{E}}{kT} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \right) = 0;$$

$$E_{\text{вер}} = \frac{kT}{2}.$$

Поскольку

$$v_{\text{вер}} = \sqrt{\frac{2kT}{m}},$$

следовательно,

$$\frac{mv_{\text{вер}}^2}{2} = kT \neq E_{\text{вер}}.$$

9.3. Решение.

Распределение Максвелла

$$f(v) = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} v^2 \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right);$$

$$dP(v) = f(v) dv.$$

Вероятность попадания скорости в конечный интервал от v_1 до v_2

$$P(v_1, v_2) = \int_{v_1}^{v_2} f(v_2) dv_2;$$

$$P(v > v_{2cp}) = \eta = \frac{\Delta N}{N} = \int_{v_{cp}}^{\infty} f(v_2) dv_2;$$

$$\eta = \int_{v_{cp}}^{\infty} 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} v^2 \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right) dv.$$

Сделаем замену переменной:

$$v = u v_{\text{вер}} = u \sqrt{\frac{2kT}{m}};$$

$$dv = \sqrt{\frac{2kT}{m}} du;$$

$$\eta = \int_{u_0}^{\infty} 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \left(\frac{2kT}{m} \right)^{3/2} u^2 \exp(-u^2) du;$$

$$u_0 = \frac{v_{cp}}{v_{\text{вер}}} = \sqrt{\frac{4}{\pi}};$$

$$\eta = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_{u_0}^{\infty} u^2 \exp(-u^2) du;$$

$$\eta = \frac{4 \cdot 0,21}{\sqrt{\pi}} = 0,47.$$

$$9.4. \langle U \rangle = kT \left[1 - \frac{m_0 g h}{kT} \frac{1}{e^{\frac{m_0 g h}{kT}} - 1} \right].$$

9.5. Решение.

Так же, как в задаче 9.2:

$$f(v) dv = v f(E) dE \text{ при } E = \frac{mv^2}{2};$$

$$f(v) = f(E) \Big|_{E=\frac{mv^2}{2}} \frac{dE}{dv};$$

$$\frac{dE}{dv} = mv;$$

$$f(v) = \frac{\sqrt{2m^3}}{n\pi^2\hbar^3} \frac{\sqrt{\frac{mv^2}{2}}}{\exp\left(\frac{\frac{mv^2}{2} - \varepsilon_F}{kT}\right) + 1} mv;$$

$$f(v) = \frac{m^3}{n\pi^2\hbar^3} \frac{v^2}{\exp\left(\frac{mv^2 - 2\varepsilon_F}{2kT}\right) + 1}.$$

При $T=0$

$$f(v) = \frac{m^3}{n\pi^2\hbar^3} v^2 \text{ при } v < v_{\max};$$

$$f(v) = 0 \text{ при } v > v_{\max};$$

$$v_{\max} = \sqrt{\frac{2\varepsilon_F}{m}} \text{ (см. рис. 9.2).}$$

Средняя скорость

$$\langle v \rangle = \int_0^{\infty} v f(v) dv.$$

При $T=0$

$$\langle v \rangle = \int_0^{v_{\max}} \frac{m^3}{n\pi^2\hbar^3} v^3 dv = \frac{m^3}{4n\pi^2\hbar^3} v_{\max}^4 = \frac{m\varepsilon_F^2}{n\pi^2\hbar^3};$$

$$\varepsilon_F = \hbar^2 \frac{(3n\pi^2)^{2/3}}{2m},$$

$$\langle v \rangle = \frac{3\hbar}{4m} (3\pi^2 n)^{1/3} = \frac{3}{4} v_{\max}.$$

Средняя энергия

$$\langle E \rangle = \int_0^{\infty} E f(E) dE.$$

При $T=0$

$$f(E) = \frac{\sqrt{2m_0^3}}{n\pi^2\hbar^3} \sqrt{E} = \frac{3}{2(\varepsilon_F)^{3/2}} \sqrt{E} \text{ при } E < \varepsilon_F.$$

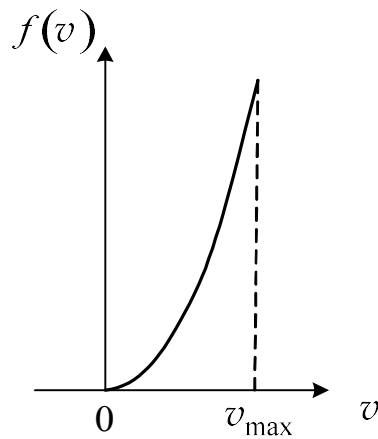


Рис. 9.2. Распределение по скоростям для нерелятивистских фермионов с половинным спином

$$\langle E \rangle = \int_0^{\varepsilon_F} \frac{3}{2(\varepsilon_F)^{3/2}} E \sqrt{E} dE = \frac{2}{5} \frac{3}{2(\varepsilon_F)^{3/2}} (\varepsilon_F)^{5/2} = \frac{3}{5} \varepsilon_F.$$

Среднеквадратичная скорость

$$v_{\text{кв}} = \sqrt{\langle v^2 \rangle} = \sqrt{\left\langle \frac{2E}{m} \right\rangle} = \sqrt{\frac{2}{m} \langle E \rangle};$$

$$\langle E \rangle = \frac{3}{5} \varepsilon_F = \frac{3}{5} \frac{m v_{\text{max}}^2}{2};$$

$$v_{\text{кв}} = \sqrt{\frac{3}{5}} v_{\text{max}} > \langle v \rangle.$$

9.6. $\eta = 0,64$.

9.7. $p = \int_0^{\infty} u_{\omega} d\omega = \frac{1}{3} u$, где $u_{\omega} = n_{\omega} \varepsilon_{\phi}$, $p_{\omega} = \frac{1}{3} n_{\omega} \varepsilon_{\phi}$; здесь индекс ω

соответствует давлению фотонов, излучаемых на частоте ω , объёмная концентрация которых равна n_{ω} ; ε_{ϕ} – энергия тех же фотонов.

9.8. Решение.

Фотоны подчиняются статистике Бозе ($\mu = 0$):

$$\langle N_m \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_m}{kT}\right) - 1}.$$

Квантовое состояние фотона задается импульсом (волновым вектором) $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ и спиральностью $\lambda = \pm\hbar$. Энергия состояния

$$E = pc = \hbar\omega.$$

Число фотонов с энергией, близкой к E , равно

$$dN(E) = \langle N_m \rangle \Big|_{E_m=E} dG(E),$$

где $dG(E)$ – число квантовых состояний с энергией от E до $E+dE$;

$G(E) = \frac{8}{3}\pi\left(\frac{E}{2\pi\hbar c}\right)^3 V$ – число квантовых состояний с энергией, не превышающей E ;

$$dG(E) = \frac{dG}{dE} dE = \frac{E^2}{\pi^2 \hbar^3 c^3} V dE;$$

$$dN(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E}{kT}\right) - 1} \left(\frac{E^2}{\pi^2 \hbar^3 c^3} \right) V dE.$$

Число фотонов с энергией от E до $E+dE$ в единице объёма

$$dn(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E}{kT}\right) - 1} \left(\frac{E^2}{\pi^2 \hbar^3 c^3} \right) dE.$$

Концентрация фотонов

$$n = \int dn(E) = \int_0^{\infty} \frac{1}{\exp\left(\frac{E}{kT}\right) - 1} \cdot \frac{E^2}{\pi^2 \hbar^3 c^3} dE,$$

откуда

$$n = \beta \frac{k^3 T^3}{\pi^2 \hbar^3 c^3};$$

$$\beta = \int_0^{\infty} \frac{x^2 dx}{e^x - 1} = 2,404;$$

численное значение

$$n \approx 10^{14} \text{ м}^{-3}.$$

$$\mathbf{9.9.} \quad T_0 = 3,31 \frac{\hbar^2}{m_0 k} \left(\frac{N_A}{V_\mu g} \right)^{2/3} = 0,27 \text{ К}, \text{ где } m_0 \text{ – масса атома; } V_\mu \text{ –}$$

молярный объем газа, $g = 2$ – число внутренних степеней свободы.

Приложение 1

НЕКОТОРЫЕ ВНЕСИСТЕМНЫЕ ЕДИНИЦЫ

Наименование величины	Наименование	Обозначение		Значение в единицах СИ
		Российское	Международное	
Длина	микрометр (микрон)	мкм (мк)	μm	10^{-6} м
	нанометр	нм	nm	10^{-9} м
	ангстрем	Å	Å	10^{-10} м
Энергия	электронвольт	эВ	eV	$1,6 \cdot 10^{-19}$ Дж

Приложение 2

ФИЗИЧЕСКИЕ ПОСТОЯННЫЕ

Скорость света в вакууме	$c = 2,998 \cdot 10^8$ м/с
Постоянная Планка	$h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ Дж·с $\hbar = h/2\pi = 1,055 \cdot 10^{-34}$ Дж·с
Постоянная Больцмана	$k = 1,381 \cdot 10^{-23}$ Дж/К
Постоянная Ридберга	$R = 1,097 \cdot 10^7$ м ⁻¹
Постоянная Авогадро	$N_A = 6,022 \cdot 10^{23}$ моль ⁻¹
Электрическая постоянная	$\epsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12}$ Ф/м
Магнитная постоянная	$\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$ Гн/м
Элементарный заряд	$e = 1,60 \cdot 10^{-19}$ Кл
Радиус 1-ой Боровской орбиты	$r_0 = 0,53 \cdot 10^{-10}$ м
Масса покоя электрона	$m_e = 9,11 \cdot 10^{-31}$ кг
Масса покоя протона	$m_p = 1,672 \cdot 10^{-27}$ кг
Масса покоя нейтрона	$m_n = 1,675 \cdot 10^{-27}$ кг

НЕКОТОРЫЕ ИНТЕГРАЛЫ

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-x} dx = n!$$

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$$

$$\int_0^{\infty} x^{1/2} e^{-ax} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2} a^{-3/2}$$

$$\int_0^{\infty} x^{3/2} e^{-ax} dx = \frac{3}{4} \sqrt{\pi} a^{-5/2}$$

$$\int_0^{\infty} e^{-x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

$$\int_0^{\infty} x e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2a}$$

$$\int_0^{\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{4} a^{-3/2}$$

$$\int_0^{\infty} x^3 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2} a^{-2}$$

$$\int_0^{\infty} x^4 e^{-ax^2} dx = \frac{3}{8} \sqrt{\pi} a^{-5/2}$$

$$\int_0^{\infty} \frac{x dx}{e^x - 1} = \frac{\pi^2}{6}$$

$$\int_0^{\infty} \frac{x^2 dx}{e^x - 1} = 2,405$$

$$\int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{\pi^4}{15}$$

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

Основная литература

1. Иродов И.Е. Задачи по квантовой физике. – М.: Высшая школа, 1991.
2. Сборник задач «Оптика и атомная физика» под редакцией Гвоздовского И.В., МЭИ, 2002
3. Детлаф А.А., Яворский Б.М. Курс физики: Учебное пособие для студентов ВТУЗов. – М.: Издательский центр «Академия», 2015. – 720 с.

Дополнительная литература

1. Иродов И.Е. Квантовая физика. Основные законы. – М.: "Издательство БИНОМ. Лаборатория знаний", 2004.
2. Чертов А.Г., Воробьев А.А. Задачник по физике. – М.: Интеграл-Пресс, 1997.
3. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. – М.: Издательство Лань, 2004.
4. Ландау Л.Д. Теоретическая физика: В 10 т. Т. 3: Квантовая механика (нерелятивистская теория). – М.: Физматлит, 2001.
5. Суханов А.Д. Лекции по квантовой физике. – М.: Высшая школа, 1991.
6. Мартинсон Л.К., Смирнов Е.В. Квантовая физика.: –М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2012.
7. Сивухин Д.В. Общий курс физики. В 5 т. Т.V: Атомная и ядерная физика. – М.: Физматлит, 2008.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие.....		3
1.	Волны де Бройля. Соотношения неопределённостей.....	4
	1.1. Основные понятия и формулы.....	4
	1.2. Задачи.....	5
	1.3. Ответы и решения.....	6
2.	Модель Бора для атома водорода и водородоподобных ионов.....	11
	2.1. Основные понятия и формулы.....	11
	2.2. Задачи.....	15
	2.3. Ответы и решения.....	16
3.	Одномерное движение электрона в потенциальном поле.....	22
	3.1. Основные понятия и формулы.....	22
	3.2. Задачи.....	27
	3.3. Ответы и решения.....	29
4.	Квантовый гармонический осциллятор.....	45
	4.1. Основные понятия и формулы.....	45
	4.2. Задачи.....	47
	4.3. Ответы и решения.....	48
5.	Движение частицы в центрально-симметричном поле.....	54
	5.1. Основные понятия и формулы.....	54
	5.2. Задачи.....	56
	5.3. Ответы и решения.....	57
6.	Атом в магнитном поле. Взаимодействие спина с магнитным полем.....	64
	6.1. Основные понятия и формулы.....	64
	6.2. Задачи.....	67
	6.3. Ответы и решения.....	68
7.	Эволюция квантовых систем во времени.....	73
	7.1. Основные понятия и формулы.....	73
	7.2. Задачи.....	74
	7.3. Ответы и решения.....	75
8.	Теория возмущений. Квантовые переходы.....	86

	8.1.	Основные понятия и формулы.....	86
	8.2.	Задачи.....	88
	8.3.	Ответы и решения.....	90
9.		Статистическая физика.....	97
	9.1.	Основные понятия и формулы.....	97
	9.2.	Задачи.....	98
	9.3.	Ответы и решения.....	99
Приложения.....			105
БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК.....			107

**СБОРНИК ЗАДАЧ
ПО КУРСУ
"СПЕЦИАЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ ФИЗИКИ"**

Учебное издание

Григорьев Сергей Владимирович, **Лапина** Людмила Григорьевна,
Близнюк Владимир Васильевич

Редактор издательства
Компьютерная вёрстка

Подписано в печать . . 2023	Печать офсетная	Формат 60x84/16
Печ.л. Тираж	Изд. номер №	Заказ

Оригинал-макет подготовлен в РИО НИУ «МЭИ».
111250, Москва, Красноказарменная ул., д. 14.
Отпечатано в типографии НИУ «МЭИ».
111250, Москва, Красноказарменная ул., д. 13.