**Министерство образования и науки,
молодежи и спорта Украины
Государственное учреждение
„Луганский национальный университет
имени Тараса Шевченко”**

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

***Учебное пособие
для самостоятельной работы студентов
IV курса специальности 6.040203 «Физика»***

**Луганск
ГУ «ЛНУ имени Тараса Шевченко»
2011**

УДК 530.145(076)
ББК 22.314я73
К32

Р е ц е н з е н т ы:

Кучко А. Н. – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой теоретической и математической физики Донецкого национального университета.

Троицкая Е. П. – доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник отдела теории магнетизма и фазовых переходов Донецкого физико-технического института имени А. А. Галкина НАН Украины.

Савченко С. В. – доктор педагогических наук, профессор, ректор Луганского национального университета имени Тараса Шевченко.

К32 **Квантовая** механика : учеб. пособие для самостоятельной работы студ. IV курса спец. 6.040203 «Физика» / сост. : С. В. Кара-Мурза, Е. Е. Горбенко, В. А. Грицких, И. В. Жихарев. – Луганск : Изд-во ГУ „ЛНУ имени Тараса Шевченко”, 2011. – 129 с.

В пособии изложены основные теоретические сведения и различные типовые задачи по разделам лекционного курса. В каждом разделе подробно рассмотрены примеры решения задач, а также приведены задачи для самостоятельной работы (с ответами) по всем основным разделам курса „Квантовая механика”.

Предназначено для студентов специальности 6.040203 „Физика”, студентов физических специальностей, а также будет полезно для преподавателей высших учебных заведений, колледжей, лицеев, гимназий, школьных учителей.

УДК 530.145(076)
ББК 22.314я73

Рекомендовано к печати учебно-методическим советом
Луганского национального университета имени Тараса Шевченко
(протокол № 10 от 15 июня 2011 года)

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ

Учебное пособие предназначено для реальной помощи студентам в овладении практическими навыками при изучении квантовой механики – обязательной дисциплины профессионально-ориентированного цикла в подготовке бакалавров физики специальности 6.040203.

Пособие состоит из шести разделов, девяти приложений, таблицы вариантов индивидуальных заданий с указанием вариантов индивидуальных заданий и номерами соответствующих упражнений и задач, представленных в пособии, выполнение которых минимально необходимо для успешного изучения курса квантовой механики, а также списка рекомендуемой учебной литературы. Каждый из разделов включает краткие теоретические сведения, образцы решения нескольких характерных задач и задания для самостоятельной работы, снабженные ответами к ним.

Первый раздел посвящен экспериментальным основам квантовой механики – фотоэффекту, эффекту Комптона, волновым свойствам микрочастиц, а также полуклассической теории Бора-Зоммерфельда. Во втором разделе кратко представлен математический аппарат квантовой механики и ее основные положения. Этот раздел содержит большое количество упражнений, выполнение которых содействует освоению специфических приемов квантовой механики. В третьем разделе пособия рассматриваются одномерные квантово-механические задачи – движение микрочастиц в потенциальных ямах и при наличии потенциальных барьеров, квантовый гармонический осциллятор. Четвертый раздел пособия посвящен движению микрочастиц в центрально-симметричном поле и, в частности, теории водородоподобного атома. В пятом разделе кратко представлен теоретический материал теории возмущений, теории квантовых переходов, основные положения теории электродипольных переходов и полуклассической теории излучения. Задания для самостоятельной работы этого раздела не являются обязательными для выполнения всеми студентами – они предназначены для студентов, желающих получить более глубокие знания, оцениваемые самыми высокими баллами. Шестой раздел включает материал, связанный с понятием спина электрона – здесь рассматриваются основные положения, связанные с системами тождественных микрочастиц, электронная структура многоэлектронных атомов, векторная модель многоэлектронного атома, магнитные свойства атомов их поведение в слабом магнитном поле. Вопросы, связанные с релятивистской квантовой механикой и квантовой природой химической связи, в пособии не рассматриваются.

Основное содержание учебного пособия дополнено девятью приложениями. В приложения вынесены справочные данные, необходимые для выполнения индивидуальных заданий, а также справочный материал математического характера.

При работе с предлагаемым учебным пособием следует помнить, что оно не подменяет собой широко представленные учебную литературу и монографии по квантовой механике, приведенные в списке литературы. Успешное изучение квантовой механики с необходимостью предполагает предварительную серьезную работу с указанными источниками.

Весь материал пособия соответствует двум учебным модулям. Первый модуль включает теоретический материал первых трех разделов и выполнение индивидуальных заданий первых двух разделов. Второй учебный модуль включает теоретический материал последних трех разделов и выполнение индивидуальных заданий третьего, четвертого и шестого разделов. Как отмечалось выше, выполнение индивидуального задания к пятому разделу не является обязательным для получения положительной оценки знаний.

В заключение отметим, что знание основных положений квантовой механики и ее приложений является необходимым условием овладения профессиональными знаниями в области физики твердого тела, физики полупроводников и диэлектриков, физики магнетизма и др. Кроме того, квантовая механика является теоретической основой таких современных направлений в науке и технике как нанофизика и нанотехнологии.

1. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ. ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ КВАНТОВЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ

1.1. Корпускулярные свойства света

1.1.1. Основные соотношения

Впервые квантовые представления о природе электромагнитного излучения возникли при изучении излучения нагретых тел. Для объяснения экспериментально наблюдаемых закономерностей излучения абсолютно черного тела М.Планк предположил, что элементарные осцилляторы испускают электромагнитную энергию порциями – квантами. Полагая энергию кванта пропорциональной частоте осциллятора

$$\varepsilon = h\nu \text{ или } \varepsilon = \hbar\omega \ (h = 2\pi\hbar), \tag{1.1}$$

Планк получил следующее выражение для средней энергии гармонического осциллятора:

$$\bar{\varepsilon} = \frac{h\nu}{\exp(\frac{h\nu}{kT}) - 1}, \tag{1.2}$$

где h – *const*, k – постоянная Больцмана и T – абсолютная температура.

При этом спектральная плотность излучения абсолютно черного тела

$$\rho(\nu, T) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}, \tag{1.3}$$

а излучательная способность (энергия, излучаемая с единицы поверхности абсолютно черного тела в единицу времени в единичном частотном интервале по всем направлениям)

$$r(\nu, T) = \frac{c}{4}\rho(\nu, T). \tag{1.4}$$

Постоянная h (или $\hbar$) в (1.1) – (1.3) является универсальной константой и носит название ***постоянной Планка***; ее числовое значение

$h = 6{,}6261937\cdot10^{-34}$ Дж·с и $\hbar = 1{,}0545915\cdot10^{-34}$ Дж·с.

Из формулы Планка (1.2) непосредственно следует закон смещения Вина

$$\lambda_m T = b \ (b = 2{,}898\cdot10^{-3} \text{ м·К}), \tag{1.5}$$

где λ_m – длина волны излучения, соответствующая максимуму спектральной плотности $\rho_{\max}(\lambda, T)$.

Интегрирование (1.4) с учетом (1.3) по всем частотам приводит к закону Стефана-Больцмана для энергетической светимости (полной энергии электромагнитного излучения в единицу времени с единицы поверхности по всем направлениям):

$$r_э(T) = \sigma T^4, \tag{1.6}$$

где $\sigma = 5{,}670\cdot10^{-8}$ Вт/(м$^2\cdot$К^4) – постоянная Стефана-Больцмана.

Для объяснения всех наблюдаемых закономерностей внешнего фотоэффекта в 1905г. А.Эйнштейн выдвинул предположение о том, что электромагнитная волна представляет собой поток квантов (фотонов), каждый из которых обладает энергией (1.1). Кроме того, поскольку электромагнитная волна распространяется со скоростью света c, фотон должен обладать нулевой массой покоя, и поэтому его энергия связана с импульсом соотношением

$$\varepsilon = pc. \qquad (1.7)$$

Тогда $p = \dfrac{\hbar\omega}{c} = \dfrac{h}{\lambda} = \hbar k$ и $\vec{p} = \hbar\vec{k}$. (1.8)

Уравнение Эйнштейна для фотоэффекта имеет вид:

$$\hbar\omega = A + \frac{m_e v_{max}^2}{2}, \qquad (1.9)$$

где A – работа выхода электрона с поверхности металла, $\dfrac{m_e v_{max}^2}{2}$ – максимальная кинетическая энергия фотоэлектрона.

В 1923 г. А.Х.Комптон экспериментально установил факт изменения длины волны света при его рассеянии на свободных электронах. Используя законы сохранения энергии и импульса в системе фотон – электрон, для комптоновского изменения длины волны света при его рассеянии на свободном, первоначально покоящемся электроне можно получить выражение

$$\Delta\lambda = \frac{h}{m_e c}(1 - \cos\alpha), \qquad (1.10)$$

где α – угол рассеяния (угол между направлениями волнового вектора падающего и рассеянного фотонов).

Приведенные экспериментально наблюдаемые факты свидетельствуют о двойственности световых явлений, т.е. о корпускулярно-волновом дуализме света.

1.1.2. Примеры решения задач

Задача 1. В лабораторной системе отсчета (К-системе) фотон с частотой ω падает нормально на зеркало, которое движется ему навстречу с релятивистской скоростью V. Определить импульс, переданный зеркалу при отражении фотона: а) в системе отсчета, связанной с зеркалом; б) в К-системе.

Решение

В системе К′, связанной с зеркалом, источник излучения приближается к нему со скоростью V, совпадающей по направлению с волновым вектором фотона. В соответствии с формулой релятивистского эффекта Доплера частота фотона в системе отсчета, относительно которой он движется (К′-системе)

$$w' = w\frac{\sqrt{1-b^2}}{1-b\cos J},$$

где J – угол между направлением движения источника и волновым вектором (импульсом фотона), а $b = \frac{V}{c}$. В рассматриваемом случае $J = 0$ и в системе К′

$$w' = w\frac{\sqrt{1-b^2}}{1-b} = w\frac{\sqrt{1+b}}{\sqrt{1-b}},$$

а импульс падающего фотона $\frac{\mathbf{h}w'}{c}$. Фотон отражается от зеркала с тем же по величине и противоположным по направлению импульсом. При этом зеркалу передается импульс, равный разности проекции импульса фотона на направление первоначального движения до и после столкновения, т.е.

$$\Delta p = \frac{2\mathbf{h}w'}{c} = \frac{2\mathbf{h}w}{c}\frac{\sqrt{1+b}}{\sqrt{1-b}}.$$

В системе К импульс падающего фотона $\frac{\mathbf{h}w}{c}$. Отраженный фотон имеет частоту ω′ относительно зеркала, которое движется со скоростью V в том же направлении, что и отраженный фотон. Поэтому относительно неподвижного наблюдателя частота отраженного фотона

$$w'' = w'\frac{\sqrt{1+b}}{\sqrt{1-b}} = w\frac{1+b}{1-b}.$$

Тогда импульс, полученный зеркалом

$$\Delta p = \frac{\mathbf{h}w}{c} + \frac{\mathbf{h}w''}{c} = \frac{\mathbf{h}w}{c}\left(1+\frac{1+b}{1-b}\right) = \frac{2\mathbf{h}w}{c}\frac{1}{1-b}.$$

Нетрудно убедиться в том, что во втором случае величина Δp больше. Такой результат связан с тем, что в первом случае не учитывается движение и импульс самого зеркала.

Задача 2. Оба электрода фотоэлемента, анод которого медный замкнуты накоротко так, что между ними имеется тормозящее электрическое поле, обусловленное только внешней контактной разностью потенциалов. Найти максимальную скорость фотоэлектронов, достигающих анода при освещении катода светом длиной волны λ = 0,22 мкм.

Решение

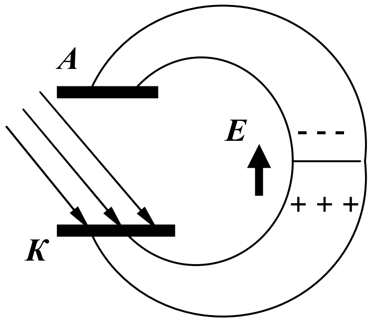


Рис.1.1

Пусть A_A – работа выхода материала анода и A_K – работа выхода материала катода. Т.к. потенциальная энергия электронов в металле W меньше, чем в вакууме, и принимая потенциальную энергию электронов в вакууме равной нулю, для работы выхода можно записать

$$A = -W.$$

Если $A_A > A_K$, то $W_K > W_A$, и электроны в области контакта переходят из материала, где их энергия выше, в материал, где их энергия ниже, т.е. из материала катода в материал анода. При этом в области контакта возникает электрическое поле (рис.1.1) и разность потенциалов, препятствующая переходу электронов. При равновесии

$$W_K - W_A = A_A - A_K = eU_З,$$

где $U_З$ – задерживающая разность потенциалов.

Если максимальную скорость фотоэлектронов при вылете с поверхности катода обозначить v_0, а максимальную скорость, с которой фотоэлектроны достигают анода – v, то из закона сохранения энергии следует, что

$$\frac{mv_0^2}{2} = eU_З + \frac{mv^2}{2} = (A_A - A_K) + \frac{mv^2}{2}.$$

Тогда уравнение фотоэффекта запишется в виде

$$\frac{hc}{l} = A_K + (A_A - A_K) + \frac{mv^2}{2} = A_A + \frac{mv^2}{2}.$$

Отсюда находим максимальную скорость фотоэлектронов, достигающих анода:

$$v = \sqrt{\frac{2}{m}\left(\frac{hc}{l} - A_A\right)}.$$

Учитывая, что для меди A_A = 4,47 эВ = $7{,}152\cdot10^{-19}$ Дж, подстановка числовых значений дает v = $2{,}2\cdot10^5$ м/с.

Задача 3. При столкновении с релятивистским электроном фотон рассеялся под углом 60^0, а электрон остановился. Найти: а) комптоновское смещение длины волны рассеянного фотона; б) кинетическую энергию электрона до столкновения, если энергия налетающего фотона равна энергии покоя электрона.

Решение

а) Рассматриваемый в задаче процесс носит название обратного эффекта Комптона, т.к. в этом случае электрон передает свою кинетическую энергию фотону, в результате чего энергия рассеянного фотона превышает его энергию до столкновения, а длина волны уменьшается ($\lambda > \lambda'$).

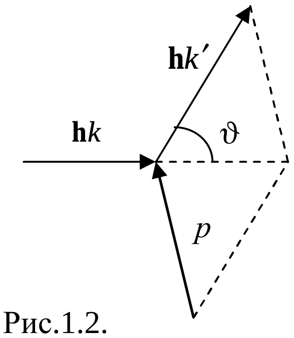


Рис.1.2.

С учетом того, что электрон релятивистский, закон сохранения энергии можно записать в виде:

$$\frac{hc}{l}+\sqrt{p^2c^2+m_e^2c^4}=\frac{hc}{l'}+m_ec^2. \qquad (1)$$

На рис.1.2 схематически представлены импульсы электрона p и фотона $\mathbf{h}\vec{k}$ до столкновения, а также импульс рассеянного фотона $\mathbf{h}\vec{k}'$. В соответствии с законом сохранения импульса

$$\mathbf{h}\vec{k}+\vec{p}=\mathbf{h}\vec{k}'.$$

Переходя к длинам волн ($\mathbf{h}k=\frac{h}{l}$) и используя треугольник импульсов рис.1.2, получаем

$$p^2=\left(\frac{h}{l}\right)^2+\left(\frac{h}{l'}\right)^2-2\frac{h^2}{l\,l'}\cos J. \qquad (2)$$

Избавимся от иррациональности в уравнении (1) и разделим его на c^2. Тогда (1) можно переписать в виде:

$$p^2=h^2\left(\frac{1}{l'}-\frac{1}{l}\right)^2+2m_ech\left(\frac{1}{l'}-\frac{1}{l}\right) \qquad (3)$$

Исключим из (2) и (3) импульс электрона p^2, приравнивая правые части этих уравнений. В результае несложных преобразований получаем

$$-\frac{h^2}{l\,l'}\cos J=-\frac{h^2}{l\,l'}+m_ech\left(\frac{1}{l'}-\frac{1}{l}\right). \qquad (4)$$

Учитывая, что $\left(\frac{1}{l'}-\frac{1}{l}\right)=\frac{\Delta l}{l\,l'}$, из уравнения (4) окончательно получаем

$$\Delta l=\frac{h}{m_ec}(1-\cos J).$$

Для условия задачи $\cos J=\cos 60^0=1/2$, и $\Delta l=\frac{h}{2m_ec}=1{,}2\cdot 10^{-12}$ (м).

б) Если энергия налетающего фотона $hn=m_ec^2$, то, учитывая, что энергию электрона до столкновения можно записать как $E_{кин}+m_ec^2$, закон сохранения энергии (1) принимает вид $E_{кин}+m_ec^2=hn'$. Но $n'=n+\Delta n$, поэтому $hn'=hn+h\Delta n=m_ec^2+h\Delta n$ и $E_{кин}=h\Delta n$.

Т.к.

$$\Delta l=l-l'=c\left(\frac{1}{n}-\frac{1}{n'}\right)\cong\frac{c\Delta n}{n^2},$$

то $\Delta n = \dfrac{n^2 \Delta l}{c}$. Тогда в рассматриваемом случае $\Delta n = \dfrac{hn^2}{2m_e c^2}$. Окончательно получаем

$$E_{кин} = \frac{(hn)^2}{2m_e c^2} = \frac{1}{2} m_e c^2 = 256 \text{ (кэВ)}.$$

1.1.3. Задания для самостоятельной работы

1.1. Для доказательства корпускулярной природы света А.Ф.Йоффе и Н.Н.Добронравов облучали рентгеновскими лучами слабой интенсивности (n_0=100 квантов/с) висмутовую пылинку диаметром d = 0,6 мкм на расстоянии l = 0,2 мм от точечного источника этих лучей. В среднем через каждые τ = 30 мин. пылинка теряла один фотоэлектрон. Показать, что корпускулярные представления приводят именно к такой величине времени.

Ответ: $t = \dfrac{16 l^2}{n_0 d^2} \cong 1{,}8 \cdot 10^3$ с=30 *мин.*

1.2. Импульс излучения, состоящий из n = 6·10^4 квантов света длиной волны с λ = 0,3 мкм, падает на фоточувствительную поверхность, спектральная чувствительность которой для данной длины волны J = 4,5 мА/Вт. Найти количество фотоэлектронов, освобождаемых таким импульсом.

Ответ: $N = \dfrac{nhc}{l e} J \approx 930$ *фотонов.*

1.3. Плоскую цинковую пластинку освещают излучением со сплошным спектром, коротковолновой границе которого соответствует длина волны 30 мкм. Вычислить, на какое максимальное расстояние l_{max} от поверхности пластинки может удалиться фотоэлектрон, если вне пластинки имеется тормозящее однородное электрическое поле напряженностью E =1 В/см.

Ответ: $l_{max} = \dfrac{1}{eE}\left(\dfrac{hc}{l} - A\right)$.

1.4. Микроскопическая частица вольфрама под действием кванта света длиной волны λ = 272 нм испускает фотоэлектрон под прямым углом к направлению падающего кванта. Определить величину и направление импульса, переданного частице в результате поглощения кванта и испускания фотоэлектрона, если известно, что последний вылетает со скоростью, составляющей η = 0,02 максимально возможной при данных условиях.

Ответ: $p = \sqrt{2m_e h^2\left(\frac{hc}{l} - A\right) + \left(\frac{h}{l}\right)^2} \cong 3{,}7\cdot 10^{-27}\,кг\cdot м/с, \cos a = \frac{h}{l\,p} \approx 0{,}66.$

1.5. Квант, длиной волны λ = 34,2, нм вырывает с чистой поверхности металлического лития фотоэлектрон, который описывает в магнитном поле, напряженностью $H = \frac{1{,}5\times 10^4}{4p}$ А/м, окружность радиусом ρ = 1,2 см. Определить энергию, затраченную на освобождение электрона из атома лития.

Ответ: $\Delta E = \frac{hc}{l} - A - \frac{m_0^2 e^2 H^2 r^2}{2m_e} = 5{,}45\,эВ.$

1.6. Вакуумный фотоэлемент состоит из двух пластин – медной и платиновой, замкнутых снаружи накоротко. При освещении одной из них (какой?) вылетающие фотоэлектроны попадают в тормозящее электрическое поле, обусловленное внешней контактной разностью потенциалов. Определить предельную длину волны света, при которой фотоэлектроны начинают достигать противоположной пластины.

Ответ: $l_{пр} = \frac{hc}{A_{Pt}} \cong 234{,}8\,нм.$

1.7. Фототок, возникающий в цепи фотоэлемента при освещении поверхности вольфрама светом длиной волны λ = 253,7 нм, прекращается при включении задерживающей разности потенциалов *U* = 1 В. Определить значение и «направление» внешней контактной разности потенциалов.

Ответ: $U_к = \frac{hc}{l\,e} - \frac{A}{e} - U_з = -0{,}6\,B$ *– поле ускоряющее.*

1.8. Поверхность калия в фотоэлементе освещают светом длиной волны λ=95 мкм. Определить минимальную задерживающую разность потенциалов $U_з$, которую необходимо приложить извне для полного прекращения фототока, если известно, что внешняя контактная разность потенциалов, $U_к$, равная 0,7 В, направлена противоположно приложенному напряжению.

Ответ: $U_з = \frac{hc}{el} - \frac{A}{e} + U_к = 11{,}75\,B.$

1.9. Фотоэлемент состоит из двух разнородных электродов, один из которых освещают монохроматическим светом длиной волны λ = 185 мкм. Фототок возникает лишь при наличии приложенного извне ускоряющего напряжения *U* = 0,4 В. Кроме того, известно, что внешняя контактная разность потенциалов между данными электродами $U_к$ равна 1,81 В. Определить работу выхода освещаемого электрода.

Ответ: $A = \frac{hc}{l} - e(U_к - U) = 5{,}29\,эВ.$

1.10. Электроды вакуумного фотоэлемента (один цезиевый, другой – медный) замкнуты снаружи накоротко. Цезиевый электрод освещается монохроматическим светом. Определить: а) длину волны света, при которой в цепи фотоэлемента появляется ток; б) максимальную скорость фотоэлектронов, подлетающих к медному электроду, если длина волны света λ = 0,220 мкм.

Ответ: а) $l_{пред} = \frac{hc}{A_{Cu}} = 280\,нм$*: б)* $v_{max} = \sqrt{\frac{2}{m}\left(\frac{hc}{l} - A_{Cu}\right)} \approx 10^6\,м/с.$

1.11. Ток, возникающий в цепи вакуумного фотоэлемента при освещении цинкового электрода светом длиной волны λ = 262 нм, прекращается, когда внешняя задерживающая разность потенциалов $U_з$ достигает 1,4 В. Определить значение и полярность внешней контактной разности потенциалов фотоэлемента.

Ответ: $U_к = \frac{hc}{le} - \frac{A}{e} - U_з = 0{,}35\,В;$ *поле ускоряющее.*

1.12. Фотон с λ = 0.017 нм вырывает из покоящегося атома электрон, энергия связи которого E = 69,3 кэВ. Найти импульс, переданный атому в результате этого процесса, если электрон вылетел под прямым углом к направлению падающего фотона.

Ответ: $p \cong \frac{h}{l}\sqrt{1 + 2m\left(\frac{cl}{h} - \left(\frac{l}{h}\right)^2 E\right)}.$

1.13. Между точечным источником света и фотоэлементом на расстоянии 20 см от источника помещена линза диаметром 10 см с оптической силой 5 дптр. Определить ток насыщения в цепи фотоэлемента, если чувствительность фотоэлемента 20 мкА/лм, рабочая площадь фотокатода 20 см^2, сила света источника 60 кд и коэффициент пропускания линзы 0,9. На каком расстоянии от линзы должен быть расположен фотоэлемент? Сколько фотонов ежесекундно падает на катод?

Ответ: $l_1 = l\left(1 - d/2\sqrt{2/S}\right) \equiv l/2 = 10\,см,\ I_{нас} = B\frac{pd^2}{4l^2}hJ \approx 1\,мА,$

$$N = \frac{I}{Je} = 10^{20}\,фот./с.$$

1.14. Электроды вакуумного фотоэлемента (один электрод цезиевый, другой – медный) замкнуты накоротко. Цезиевый электрод освещается монохроматическим светом длиной волны, при которой в цепи фотоэлемента появляется ток. Определить скорость фотоэлектронов v при условии, что к электродам фотоэлемента прикладывается ускоряющее напряжение U = 2 В.

Ответ: $l_{пред} = \dfrac{hc}{A_{Cu}} = 280\,нм;\quad \mathrm{v} = \sqrt{\dfrac{2}{m}\left(\dfrac{hc}{l} - A_{Cu} + eU\right)} = 9\cdot 10^5\,м/с.$

1.15. При поочередном освещении поверхности некоторого металла светом с длинами волн λ_1 = 0,35 мкм и λ_2 = 0,54 мкм обнаружено, что соответствующие максимальные скорости фотоэлектронов отличаются друг от друга в η = 2 раза. Найти работу выхода с поверхности этого металла.

Ответ: $A = ch\dfrac{\left(h^2 - l_2 / l_1\right)}{l_2\left(h^2 - 1\right)} = 1{,}9\,эВ.$

1.16. До какого максимального потенциала зарядится удаленный от других тел медный шарик при облучении его электромагнитным излучением с длиной волны λ = 140 нм?

Ответ: j_{max} = *4,4 В.*

1.17. Электромагнитное излучение с длиной волны λ = 0,3 мкм падает на фотоэлемент, находящийся в режиме насыщения. Соответствующая спектральная чувствительность фотоэлемента J = 4,8 мА/Вт. Найти выход фотоэлектронов, т.е. число фотоэлектронов на каждый падающий фотон.

Ответ: $w = \dfrac{chJ}{el} = 0{,}02$.

1.18. Доказать, что свободный электрон не может поглотить фотон.

1.19. Найти максимальный угол $J_{\max}$ рассеяния γ-квантов при комптон-эффекте на неподвижных электронах, вне которого рассеянный квант не может породить электрон-позитронную пару при последующем взаимодействии с веществом. Рождение электрон-позитронной пары возможно, если энергия γ-кванта превышает $2m_e c^2$ (m_e - масса покоя электрона).

Ответ: $J_{\max} = 60^{\mathbf{0}}$.

1.20. Фотон (λ = 0,4 нм) рассеивается на электроне, движущемся навстречу ему, и после рассеяния движется в обратном направлении. С какой скоростью v должен двигаться электрон, чтобы частота фотона при рассеянии не изменилась?

Ответ: $\mathrm{v} = \dfrac{c}{\sqrt{1 + \left(mc\,l / h\right)^2}} \approx 0{,}08c = 2{,}4\cdot 10^7$.

1.21. Фотон от рубинового лазера (λ = 0,6943 мкм) испытывает лобовое столкновение с электроном, имеющим кинетическую энергию $E_к$ = 500 МэВ. Определить энергию E_γ фотона, испускаемого в результате «обратного» комптон-эффекта, и движущегося вдоль траектории электрона.

Ответ: $E_g = E_к + \dfrac{hc}{l} \approx 500\,МэВ.$

1.22. В результате комптоновского рассеяния фотона на покоящемся электроне последний получил импульс отдачи p. Определить, под какими углами, по отношению к направлению падающего фотона, мог вылететь электрон с таким импульсом.

Ответ: $\sin j < \dfrac{\sqrt{p^2 + m_e^2 c^2} - m_e c}{p}.$

1.23. С помощью формулы Комптона найти зависимость между углом рассеяния фотона J и углом φ, под которым движется электрон отдачи.

Ответ: $ctg\, j = \left(1 + \dfrac{h}{mc\,l}\right) tg\dfrac{J}{2}.$

1.24. Определить изменение длины волны и энергии γ-кванта с первоначальной энергией ε = 1 МэВ, если известно, что комптоновский электрон отдачи вылетает под углом $J = 30^0$ к направлению движения падающего кванта.

Ответ: $\Delta e = -\dfrac{6m_e c^2}{4\left(1 + (m_e c^2)/e\right) - 3} = -0{,}5\,МэВ, \quad \Delta l = hc\dfrac{|\Delta e|}{e\,(e - |\Delta e|)} = 0{,}0123\,\mathring{A}.$

1.25. Найти длину волны падающего фотона, если известно, что энергия рассеянного фотона равна кинетической энергии электрона отдачи при угле 90^0 между направлениями их движения.

Ответ: $l = \dfrac{h}{2m_e c} = 0{,}012\,\mathring{A}.$

1.26. Квант, соответствующий коротковолновой границе сплошного рентгеновского спектра при напряжении на трубке U = 60 кВ, испытывает комптоновское рассеяние на угол $J = 120^\circ$ и затем вырывает фотоэлектрон с К-оболочки атома молибдена. Вычислить энергию фотоэлектрона вдали от атома, энергия ионизации К-оболочки которого E_i = 20 кэВ.

Ответ: $E = \dfrac{eU}{1 + \dfrac{2eU}{m_e c^2}\sin^2\dfrac{j}{2}} - E_i = 3\,кэВ.$

1.27. В опыте по комптоновскому рассеянию обнаружено, что рассеянный квант отлетел под углом J к направлению первоначального движения, а электрон отдачи описал окружность радиуса r в магнитном поле, перпендикулярном плоскости рассеяния (индукция поля B). Найти длину волны налетающего кванта, если: а) $J = 60^0$, r = 1,5 см, B = 0,02 Тл; б) $J = 90^0$, r = 2 см, B = 0,3 Тл.

Ответ: $l = \dfrac{\Delta l}{2}\left(\sqrt{1+\dfrac{4hc}{e\Delta l}}-1\right)$;

а) электрон нерелятивистский, $e = \dfrac{(eBr)^2}{2m_e}$ *и* l *= 0,43Å;*

б) электрон релятивистский, $e = \dfrac{m_e c^2}{2}\left(\sqrt{1+\left(\dfrac{eBr}{2m_e c}\right)^2}-1\right)$ *и* $l = 0{,}011$*Å.*

1.28. Фотон длиной волны λ соударяется с электроном, импульс которого p перпендикулярен направлению движения фотона. Найти выражение, определяющее величину изменения длины волны рассеянного фотона.

Ответ: $\Delta l = \dfrac{h}{\sqrt{p^2 + m_e^2 c^2}}\left[(1-\cos J - 1) + \dfrac{pl}{h}\sin J\right]$.

1.29. Фотон с импульсом p = 60 кэВ/c, испытав комптоновское рассеяние под углом $J = 120^0$ на покоящемся свободном электроне, вырвал затем из атома молибдена электрон, энергия связи которого E_i = 20 кэВ. Найти кинетическую энергию фотоэлектрона.

Ответ: $E_к = \dfrac{m_e c^2 p_ф}{m_e c + p_ф(1-\cos J)} - E_i = 30$ *кэВ.*

1.30. Фотон с энергией ε = 374 кэВ испытал рассеяние на покоящемся свободном электроне. Определить угол между направлениями разлета электрона отдачи и рассеянного фотона, комптоновское смещение длины волны Δλ которого составляет 1,25 пм.

Ответ: $\sin b = \dfrac{pc}{e}\sqrt{1-\cos^2 J}$, *где* $\cos J = 1 - \dfrac{m_e c\Delta l}{h} = 0{,}5$,

$p = \dfrac{\sqrt{\Delta e\left(\Delta e + 2m_e c^2\right)}}{c}$ $\Delta e = e - e' = \dfrac{e\Delta l}{(hc/l) - \Delta l}$ *и* $b = 90°$.

1.31. Фотон испытал рассеяние на покоящемся свободном электроне. Найти импульс падающего фотона, если энергия рассеянного фотона равна кинетической энергии $E_к$ электрона отдачи при угле 90° между направлениями их разлета.

Ответ: $p_ф = \dfrac{E_к}{c}\left(0{,}8 + 0{,}6\sqrt{1+\dfrac{2m_e c^2}{E_к}}\right).$

1.32. На какой угол рассеялся γ-квант с энергией ε = 0,8 МэВ в результате столкновения с покоящимся свободным электроном, если скорость электрона отдачи оказалась равной v = 0,8*c*?

Ответ: $\cos J = 1 - \dfrac{m_e c^2/e}{4 - m_e c^2/e} = 0{,}85$ *и* $J = 30°$.

1.33. Фотон с импульсом $p_ф$ = 1,02 МэВ/*c* испытывает рассеяние на покоящемся свободном электроне. Найти комптоновское смещение длины волны рассеянного фотона, если электрон отдачи вылетел под углом 90° к направлению падающего фотона.

Ответ: $\Delta l = \dfrac{6m_e ch}{\left(p_ф + 2m_e c\right)^2} = 1\,пм.$

1.34. Фотон с импульсом $p_ф$ = 1,02 МэВ/*c* испытывает рассеяние на покоящемся свободном электроне. Найти комптоновское смещение длины волны рассеянного фотона, если электрон отдачи приобрел импульс *p* = 0,51 МэВ/*c*.

Ответ: $\Delta l = \dfrac{h}{p_ф + m_e c - \sqrt{p_e^2 + (m_e c)^2}} - \dfrac{h}{p_ф} = 0{,}34\,пм.$

1.35. Найти энергию налетающего фотона, если известно, что при рассеянии под углом $J = 60^0$ на покоящемся свободном электроне последний приобрел кинетическую энергию $E_к$ = 0,45 МэВ.

Ответ: $e = \dfrac{2m_e c^2}{\sqrt{1 + 2(m_e c^2)/E_к}} \cong 0{,}56\,МэВ.$

1.2. Атом Резерфорда. Теория Бора-Зоммерфельда

1.2.1. Основные положения

В соответствии с планетарной моделью, предложенной Э.Резерфордом в 1911 г., каждый из *Z* электронов атома движется по эллиптической орбите, в одном из фокусов которой находится положительно заряженное ядро зарядом *Ze* (*Z* – порядковый номер элемента в периодической таблице Д.И.Менделеева).

Характерный линейный размер ядра составляет величину порядка $10^{-15} \div 10^{-14}$м, электронной орбиты – 10^{-10}м. Для объяснения существования стабильных атомов Н. Бор (1912 г.) выдвинул следующие положения:

1) существуют орбиты, называемые стационарными, находясь на которых электрон не излучает электромагнитную энергию, т.е. энергия электрона не меняется;

2) при переходе с одной стационарной орбиты на другую электрон излучает или поглощает квант электромагнитной энергии

$$\hbar\omega = E_m - E_n, \tag{1.11}$$

где m и n – целые числа, принимающие значения 1, 2, 3, ...

Стационарность орбиты устанавливается правилами квантования Бора-Зоммерфельда (1916 г.), в соответствии с которыми для стационарного финитного движения справедливы условия

$$\oint p_i dq_i = n_i h, \tag{1.12}$$

где q_i – обобщенная координата, p_i – сопряженный ей обобщенный импульс, а $i = 1, 2, ..., s$ (s – число степеней свободы).

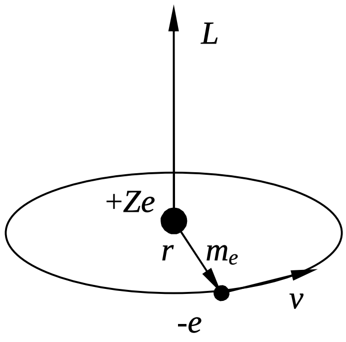


Рис.1.3

В частном случае круговой орбиты (рис.1.3) электрона в (Z-1)-кратно ионизированном (водородоподобном) атоме оставшийся электрон обладает одной степенью свободы – углом поворота φ. Сопряженным импульсом в этом случае является момент импульса L, который при движении в центрально-симметричном поле ядра сохраняется. Поэтому в рассматриваемом случае стационарными будут орбиты, для которых

$$L = mr^2\dot{\varphi} = n\hbar, \qquad n = 1, 2, 3, ... \tag{1.13}$$

Кроме того, используя второй закон Ньютона, закон сохранения энергии и учитывая выражение (1.12), для радиуса n-ой стационарной орбиты и полной энергии электрона на этой орбите можно получить следующие выражения

$$r_n = \frac{4\pi\varepsilon_0 n^2\hbar^2}{Ze^2 m_e}, \tag{1.14}$$

$$E_n = -\frac{Z^2 e^4 m_e}{32\pi^2\varepsilon_0^2 n^2\hbar^2}. \tag{1.15}$$

Полезно знать, что для радиуса первой боровской орбиты в атоме водорода r_1 принято обозначение a, причем a = 0,529 $\AA$, а энергия ионизации $E_i = -E_1 = 13{,}6$эВ. Кроме того, следует отметить, что выражение для энергии n-го стационарного состояния сохраняет вид (1.15) и для эллиптических орбит.

С учетом (1.15) боровская частота излучения (поглощения) при переходе водородоподобных атомов из m-го стационарного состояние в n-тое может быть представлена в виде:

$$\omega_{mn} = RZ^2\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) m < n, \qquad (1.16)$$

где R = 2,07·10^{16} с$^{-1}$ – ***постоянная Ридберга*** для водорода. В единицах обратных длин волн постоянная Ридберга R' = 1,097·10^{7} м$^{-1}$.

В заключение отметим, что экспериментально наблюдаемые спектры атомов теорией Бора-Зоммерфельда описываются лишь качественно. Это связано с непоследовательностью теории, в которой классическое движение частицы по траектории сочетается с квантованием орбит.

1.2.2. Примеры решения задач

Задача 1. Используя правила квантования Бора-Зоммерфельда, найти уровни энергии одномерного гармонического осциллятора массой m, собственная частота которого ω.

Решение

В качестве обобщенной координаты введем смещение осциллятора из положения равновесия x. Сопряженным импульсом при этом является величина $m\dot{x}$. Тогда условие Бора-Зоммерфельда имеет вид:

$$\oint m\dot{x} \cdot dx = nh.$$

Т.к. для гармонического осциллятора $x = A\cos\omega t$ и $\dot{x} = -A\omega\sin\omega t$ (A – амплитуда), то условие квантования можно переписать следующим образом:

$$A^2 m\omega^2 \int_0^T \sin^2\omega t \cdot dt = nh.$$

Выполняя интегрирование, получаем

$$A^2 m\omega^2 \frac{T}{2} = A^2 m\omega\pi = nh,$$

или

$$\frac{A^2 m\omega}{2} = n\hbar. \qquad (1)$$

С другой стороны, энергия гармонического осциллятора

$$E = \frac{m\dot{x}^2}{2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} = \frac{m\omega^2 A^2}{2}. \qquad (2)$$

Сравнивая (1) и (2), получаем

$$\frac{E}{\omega} = n\hbar \text{ или } E_n = n\hbar\omega.$$

Задача 2. Определить квантовое число n возбужденного атома водорода, если известно, что при переходе в основное состояние атом испускает два фотона с длинами волн λ_1 = 565,3 нм и λ_2 = 126 нм.

<u>Решение</u>

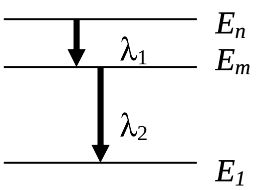


Рис.1.4

Пусть фотон с длиной волны λ_1 соответствует переходу из n-го стационарного состояния в m-ое, а λ_2 – из m-го в основное (см. рис.1.4). При этом в соответствии с (1.16)

$$\frac{1}{l_1} = R'\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) \quad \text{и} \quad \frac{1}{l_2} = R'\left(1 - \frac{1}{m^2}\right).$$

Исключим из этих уравнений величину $1/m^2$. Тогда

$$\frac{1}{l_2} = R'\left(1 - \frac{1}{n^2}\right) - \frac{1}{l_1}.$$

Из этого уравнения окончательно получаем

$$n^2 = \frac{R' l_1 l_2}{R' l_1 l_2 - l_2 - l_1} = 9, \text{ и } n = 3.$$

***Задача* 3.** Определить скорость, которую приобрел покоящийся атом водорода в результате излучения фотона при переходе из первого возбужденного состояния в основное. На сколько процентов отличается энергия испущенного фотона от энергии данного перехода.

<u>Решение</u>

Пусть V – скорость, приобретаемая атомом водорода массой M в результате отдачи. Тогда в соответствии с законами сохранения энергии и импульса получаем уравнения:

$$MV = \frac{hn'}{c}, \tag{1}$$

$$E_2 = \frac{MV^2}{2} + E_1 + hn'. \tag{2}$$

В этих уравнениях ν' – частота испущенного фотона в лабораторной системе отсчета, R – постоянная Ридберга, E_1 и E_2 – энергия атома водорода в основном и первом возбужденном состояниях соответственно, причем $E_1 = -R'hc$ и

$E_2 = -\dfrac{R'hc}{4}$. При переходе из первого возбужденного состояния в основное в системе отсчета, связанной с ядром,

$$E_2 - E_1 = h\nu = \frac{3R'hc}{4}. \qquad (3)$$

С учетом (3) из уравнения (2) имеем

$$h\nu' = h\nu - \frac{MV^2}{2}.$$

Подставляя это выражение для $h\nu'$ в уравнение (1), получаем квадратное уравнение относительно скорости, решение которого имеет вид

$$V = c\left(\sqrt{1+\frac{h\nu}{Mc^2}} - 1\right).$$

Т.к. $h\nu << Mc^2$, то выражение для скорости отдачи принимает вид

$$V = \frac{h\nu}{Mc} = \frac{3}{4}\frac{R'h}{M}. \qquad (4)$$

Подстановка числовых значений (M = 1,67·10^{-27} кг, R' = 1,097·10^{7} м$^{-1}$) приводит к значению скорости отдачи атома водорода V = 3,25 м/с.

Оценим, на сколько процентов отличается энергия испущенного фотона от энергии данного перехода, т.е. величину

$$\varepsilon = \frac{\nu - \nu'}{\nu} = \frac{MV^2}{2h\nu} = \frac{2MV^2}{3hR'c}.$$

Подставляя значения соответствующих величин, получаем ε = 0,54·10^{-8} или 0,54·10^{-6} % .

1.2.3. Задания для самостоятельной работы

1.36. Свободная частица находится в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками, расположенными при x = 0 и x = l. Определить уровни энергии частицы массы m, используя правила квантования Бора-Зоммерфельда.

Ответ: $E_n = \dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2l^2m}$.

1.37. Используя правила квантования Бора-Зоммерфельда, определить энергетические уровни частицы, совершающей малые колебания вблизи положения устойчивого равновесия в трехмерной потенциальной яме $V(x,y,z)$, причем $V(0) = 0$.

Ответ: $E_n = \hbar(n_1\omega_1 + n_2\omega_2 + n_3\omega_3)$, *$n_1, n_2, n_3$ – целые числа.*

1.38. Под действием центральной силы частица массы m свободно вращается на расстоянии r от центра поля (плоский жесткий ротатор). Найти уровни энергии частицы с использованием правил квантования Бора-Зоммерфельда.

Ответ: $E_n = \dfrac{n^2\hbar^2}{2r^2m}$.

1.39. Используя правила квантования Бора-Зоммерфельда, определить уровни энергии атома водорода, свободно движущегося в объеме:

$0 < x < a \quad 0 < y < b, \quad 0 < z < c.$

Ответ: $E = \dfrac{h^2}{2M}\left(\dfrac{n_1^2}{a^2} + \dfrac{n_2^2}{b^2} + \dfrac{n_3^2}{c^2}\right) - \dfrac{\mu e^4}{32\pi\varepsilon_0^2\hbar^2 n^2}$, *где n_1, n_2, n_3, n – целые числа, M – масса атома, μ – приведенная масса.*

1.40. Частица массой m вертикально падает на горизонтальную пластину и упруго от нее отражается. Используя правила квантования Бора-Зоммерфельда, определить допустимые высоты H_n и вычислить уровни энергии.

Ответ: $H_n = \left(\dfrac{3nh}{4m\sqrt{2g}}\right)^{2/3}$, $E_n = \left(\dfrac{3\sqrt{m}gnh}{4\sqrt{2}}\right)^{2/3}$.

1.41. Частица массой m движется по круговой орбите в центрально-симметричном поле $U = kr^2/2$ (r – радиус орбиты). Используя правила квантования, вычислить уровни энергии.

Ответ: $E_n = n\hbar\omega$, *где* $\omega = \sqrt{\dfrac{k}{m}}$.

1.42. Показать, что частота излучения водородоподобного атома, соответствующая переходу электрона с $(n + 1)$-ой орбиты на n-ю, равна частоте обращения электрона на n-ой орбите, если $n >> 1$.

1.43. Показать, что для частоты ω фотона, излучаемого атомом водорода, справедливо следующее неравенство; $\omega_n > \omega > \omega_{n+1}$, где ω_n и ω_{n+1} – частоты обращения электрона на соседних орбитах, между которыми происходит переход. Убедиться, что $\omega \to \omega_n$ при $n \to \infty$.

1.44. Используя правила квантования Бора-Зоммерфельда, найти разрешенные значения энергии частицы массой m, движущейся по круговой орбите в центрально-симметричном поле $U = -a/r$ (α – положительная постоянная).

Ответ: $E_n = -\frac{a^2 m}{2\mathbf{h}^2 n^2}$.

1.45. В соответствии с теорией Бора определить магнитный момент электрона, движущегося на n-ой орбите атома водорода. Показать, что отношение магнитного момента к механическому постоянно для всех орбит.

Ответ: $m = \frac{e\mathbf{h}}{2m} n$.

1.46. Квант света с энергией 15 эВ выбивает фотоэлектрон из атома водорода, находящегося в основном состоянии. С какой скоростью движется электрон вдали от атома?

Ответ: 7×10^5 *м/с.*

1.47. Какие спектральные линии в серии Бальмера наблюдаются при возбуждении атомов водорода электронами с энергией 12,3 эВ?

Ответ: $\lambda = 600$ *нм.*

1.48. Вычислить изменение длины волны фотона, которое возникает вследствие отдачи атома водорода при излучении. Какую скорость приобретает атом водорода при переходе электрона из состояния с $n = 2$ в основное?

Ответ: $\Delta l = \frac{h}{2Mc} = 0,66 \cdot 10^{-15}$ *м,* $\mathrm{v} = \frac{3R'h}{M} = 3,26$ *м/с.*

1.49. Исходя из законов сохранения энергии и импульса при испускании фотона движущимся атомом, получить формулу доплеровского смещения для нерелятивистского случая.

Ответ: $\frac{\Delta l}{l} \cong \frac{v}{c} \cos J$.

1.50. При наблюдении пучка возбужденных атомов водорода под углом 45° к направлению их движения длина волны головной линии серии Лаймана оказалась смещенной на 0.2 нм. Определить скорость атомов водорода.

Ответ: $\mathrm{v} = \frac{c}{\cos J} \frac{3R'}{4} \Delta l = 7 \cdot 10^3$ *м/с.*

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

Ответ: $\mathrm{v} = 3,1 \cdot 10^6$ *м/с.*

1.52. С какой минимальной скоростью должен двигаться атом водорода, чтобы в результате лобового неупругого столкновения с другим покоящимся атомом водорода один из них испустил фотон? До соударения оба атома находились в основном состоянии.

Ответ: $v = \sqrt{\dfrac{3R\mathbf{h}}{2M}} = 5,2 \cdot 10^4$ *м/с*.

1.53. С какой минимальной скоростью должны сближаться ион He^+ и атом водорода, чтобы испущенный ионом He^+ фотон, соответствующий головной линии серии Бальмера, смог возбудить атом водорода из основного состояния?

Ответ: $v/c = 0,29$, $v = 8,7 \cdot 10^7$ *м/с*.

1.54. Однократно ионизированный атом гелия находится в основном состоянии. Может ли квант света, соответствующий переходу между первыми двумя энергетическими уровнями в двукратно ионизированном атоме лития, вырвать электрон из данного иона гелия?

Ответ: Да.

1.3. Волновые свойства частиц

1.3.1. Основные положения элементарной квантовой теории

В основе элементарной квантовой теории лежит представление о корпускулярно-волновом дуализме частиц, т.е. положение о том, что свободно движущейся частице можно поставить в соответствие плоскую монохроматическую волну. Уравнение де Бройля (1916 г.) устанавливает связь между импульсом частицы p и длиной волны λ

$$l = \frac{h}{p}. \tag{1.17}$$

Наглядным проявлением корпускулярно-волнового дуализма частиц является характерная дифракционная картина, наблюдаемая при рассеянии электронного пучка на поверхности кристалла (опыты К.Д.Дэвиссона – Л.Х.Джермера, 1927 г.). На рис.1.5 изображена схема опытов Дэвиссона-Джермера; дифракционные максимумы интенсивности рассеянного электронного пучка наблюдаются при выполнении условия

$$d \sin J = n l = n\frac{h}{p}, \tag{1.18}$$

где d – постоянная кристаллической решетки

Подобно рентгеновским лучам, дифракцию электронов можно наблюдать и на пространственной кристаллической решетке при прохождении электронного пучка через тонкую поликристаллическую пленку (рис.1.6).

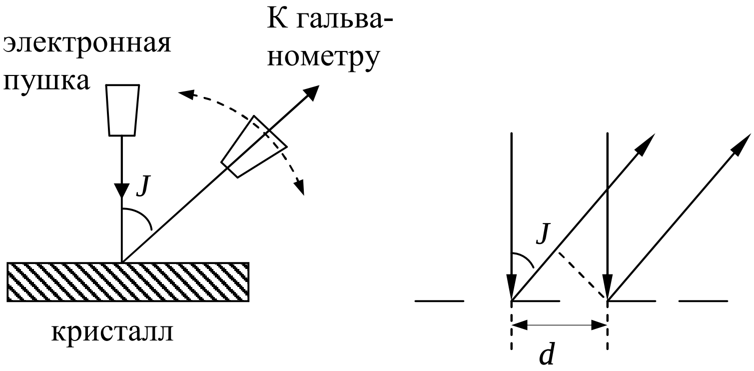


Рис.1.5
а) Схема опыта Дэвиссона-Джермера; б) дифракция электронов на плоской решетке

В этом случае условие конструктивной дифракции электронного пучка совпадает с условием дифракции рентгеновских лучей Вульфа-Брэгга:

$$2d\sin j = nl = n\frac{h}{p}. \tag{1.19}$$

Отметим, что при дифракции на плоской кристаллической решетке угол J в (1.18) – угол падения, а в (1.19) φ – угол скольжения. Кроме того, дифракция на плоской решетке наблюдается при малых энергиях электронов пучка (ускоряющее напряжение ~10 ÷ 100 В), а дифракция на пространственной решетке – при высоких энергиях (ускоряющее напряжение достигает десятка тысяч вольт)

Математическим выражением корпускулярно-волнового дуализма микрочастиц является соотношение неопределенностей Гейзенберга, связывающее сопряженные координату и импульс

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \mathbf{h}. \tag{1.20}$$

Соотношение неопределенностей указывает на принципиальную невоз-

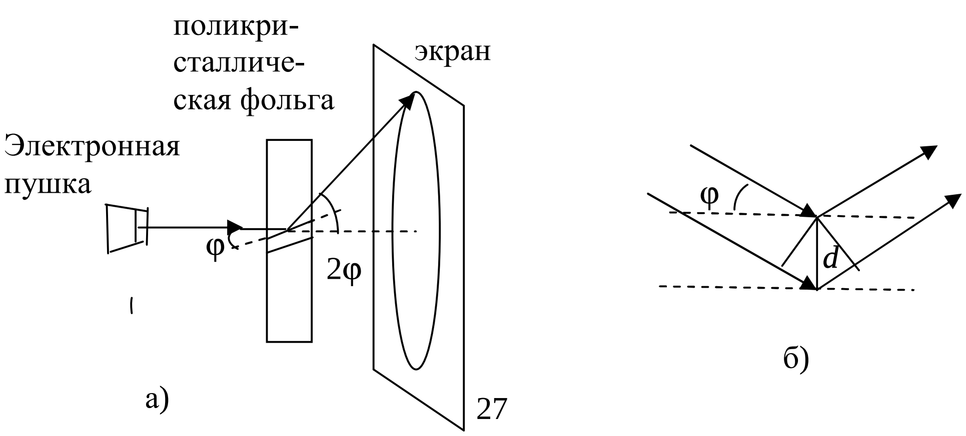


Рис.1.6. Дифракция электронов на пространственной решетке

можность одновременного измерения сопряженных координаты и импульса с одинаковой степенью точности.

1.3.2. Примеры решения задач

Задача 1. В одном из опытов Дэвиссона-Джермера по рассеянию электронов от поверхности монокристалла никеля максимум четвертого порядка наблюдался в направлении, составляющем угол $J = 55°$ с направлением падающих электронов (см. рис.1.5) при энергии последних E = 180 эВ. Вычислить межплоскостные расстояния *d*, соответствующее данному отражению. Определить, под каким углом к поверхности монокристалла ориентированы эти плоскости.

<u>Решение</u>

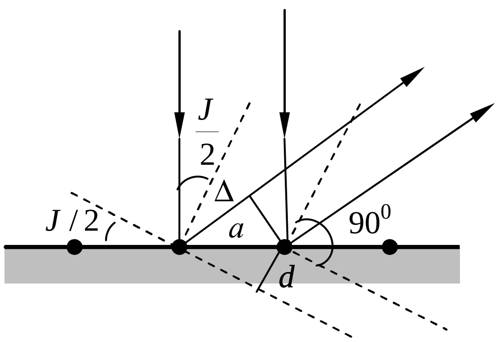


Рис.1.7

На рис.1.7 схематически представлено отражение электронов от узлов кристаллической решетки на поверхности монокристалла. Пунктирными линиями показаны атомные плоскости, которым принадлежат рассеивающие центры на поверхности, и нормали к этим плоскостям, являющиеся биссектрисами угла рассеяния J. В соответствии с условием дифракции (1.18) разность хода электронных лучей Δ определяется выражением

$$\Delta = a \sin J = n l \ .$$

С другой стороны, как видно из рис.1.7,

$$d = a \sin \frac{J}{2} .$$

Таким образом, $\dfrac{d \sin J}{\sin(J/2)} = 2d \cos \dfrac{J}{2} = n l$, и $d = \dfrac{n l}{2 \cos(J/2)}$.

Учитывая, что $l = \dfrac{h}{p} = \dfrac{h}{\sqrt{2mE}}$, окончательно получаем

$$d = \frac{nh}{2\sqrt{2mE} \cos(J/2)} .$$

Подстановка числовых значений при n = 4 приводит к значению d = 2,06·10^{-10}м = 2,06 Å.

В заключение заметим, что условие дифракции $2d \cos(J/2) = n l$ можно записать в виде условия Вульфа-Брэгга $2d \sin j = n l$, где угол скольжения $j = \dfrac{p}{2} - \dfrac{J}{2}$ (см. рис.1.7). Таким образом, условия дифракции на плоской и пространственной решетках имеют один и тот же вид, если по рассеянию электронных лучей определяются межплоскостные расстояния.

Задача 2. Получить формулу Вульфа-Брэгга учитывая, что потенциальная энергия электронов в металле меньше, чем в вакууме на величину *U*.

<u>Решение</u>

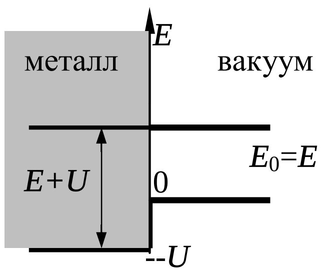


Рис.1.8

Пусть кинетическая энергия электронов пучка, падающего из вакуума на пространственную кристаллическую решетку металла, равна *E*, а потенциальная энергия равна нулю. Тогда потенциальная энергия электрона в металле равна –*U*. Т.к. полная энергия электрона $E_0 = E =$ const, то при переходе из вакуума в металл кинетическая энергия электрона увеличивается до величины $E_1 = E_0 - (-U) = E + U$ (см. рис.1.8), что обусловлено увеличением нормальной составляющей импульса при этом переходе. Схематически такое отражение от атомных плоскостей показано на рис.1.9, где φ и φ_1 – угды скольжения для падающего и преломленного лучей. Из неизменности касательных составляющих импульса в соответствии с рис.1.9 следует закон преломления для электронных волн

$$p\cos j = p_1 \cos j_1 \text{ или } \frac{\cos j}{\cos j_1} = \frac{p_1}{p} = \frac{\sqrt{2m(E+U)}}{\sqrt{2mE}} = \sqrt{\frac{E+U}{E}} = \frac{l}{l_1}.$$

При этом величину $n = \dfrac{\cos j}{\cos j_1} = \sqrt{\dfrac{E+U}{U}} = \dfrac{l}{l_1}$ можно рассматривать как показатель преломления электронных волн в металле.

Отражение электронных волн от атомных плоскостей при переходе из вакуума в металл схематически показано на рис.1.9. В этом случае разность хода лучей, отраженных от атомных плоскостей, отстоящих на расстояние *d*,

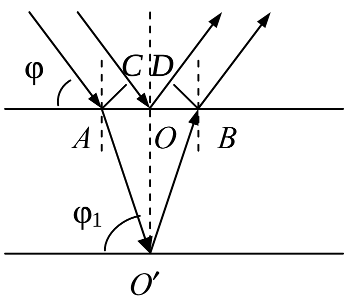


Рис.1.9

$$\Delta = 2(n \cdot AO' - OC) = 2\left(\frac{d \cdot n}{\sin j_1} - d \cdot ctg j_1 \cdot \cos j\right).$$

Учитывая, что $\sin j_1 = \sqrt{1-\cos^2 j_1} = \dfrac{\sqrt{n^2 - \cos^2 j}}{n}$, получаем

$$\Delta = 2d\frac{n^2 - \cos^2 j}{\sqrt{n^2 - \cos^2 j}} = 2d\sqrt{n^2 - \cos^2 j}.$$

Таким образом, условие конструктивной дифракции имеет вид:

$$2d\sqrt{n^2-\cos^2 j}=ml\text{, где } m=1, 2, \ldots$$

Нетрудно увидеть, что при n = 1 это условие переходит в условие Вульфа-Брэгга $2d\sin j=ml$.

Задача 3. Полагая для электрона в атоме водорода, что неопределенность его расстояния от ядра сравнима с этим расстоянием, оценить минимально возможную энергию атома водорода и соответствующее расстояние электрона от ядра.

<u>Решение</u>

Полная энергия электрона в атоме водорода $E=\dfrac{p^2}{2m}-\dfrac{a}{r}$, где $a=\dfrac{e^2}{4pe_0}$.

Т.к. расстояние от ядра r одного порядка с неопределенностью положения электрона Δr, а также учитывая, что $\Delta r\cdot\Delta p\approx\mathbf{h}$, и импульс не может быть меньше своей неопределенности, выражение для энергии можно записать в виде: $E\approx\dfrac{\mathbf{h}^2}{2m(\Delta r)^2}-\dfrac{a}{\Delta r}$. Минимуму энергии соответствует условие

$$\frac{dE}{d(\Delta r)}=-\frac{\mathbf{h}^2}{m(\Delta r)^3}+\frac{a}{(\Delta r)^2}=0.$$

Отсюда получаем значение расстояния электрона от ядра $r\approx\Delta r=\dfrac{\mathbf{h}^2}{ma}=\dfrac{4pe_0\mathbf{h}^2}{me^2}$, при котором энергия атома водорода минимальна. Сравнивая полученный результат с (1.18), убеждаемся, что это расстояние совпадает с радиусом первой боровской орбиты, т.е. r = r_1 = 0,529 Å. Соответственно, минимально возможная энергия атома водорода

$$E=E_1=\frac{ma^2}{2\mathbf{h}^2}-\frac{ma^2}{\mathbf{h}^2}=-\frac{ma^2}{2\mathbf{h}^2}=-\frac{me^4}{32pe_0\mathbf{h}^2}=-13{,}6\text{ эВ}.$$

1.3.3. **Задания для самостоятельной работы**

1.55. Какова скорость изменения дебройлевской длины волны протона $\left(\dfrac{dl}{dt}\right)$, ускоряемого продольным однородным электрическим полем напряженностью E = 3 кВ/см, в тот момент, когда его кинетическая энергия W равна 1кэВ?

Ответ: $\frac{d\,l}{dt} = \frac{eEh}{2mW}$.

1.56. Протон с кинетической энергией E = 1 кэВ упруго рассеивается на угол 90° ядром атома гелия, находившимся первоначально в покое. Определить дебройлевскую длину волны рассеянного протона.

Ответ: $l = h\sqrt{\frac{m+M}{2mE(M-m)}} = 1{,}17\,\mathring{A}$.

1.57. При какой кинетической энергии электрона его дебройлевская длина волны равна комптоновской?

Ответ: $E = m_0c^2(\sqrt{2}-1) = 0{,}212\,МэВ$.

1.58. Кинетическая энергия релятивистской частицы равна $E_к$, а ее масса покоя – m_0. Какова дебройлевская длина волны этой частицы?

Ответ: $l = \frac{hc}{\sqrt{E_k(E_k + 2m_0c^2)}}$.

1.59. Используя условие Вульфа-Брэгга, найти первые три значения ускоряющей разности потенциалов, при которых наблюдается максимальное отражение электронов в следующем опыте: пучок электронов падает на естественную грань монокристалла под углом скольжения J = 30°, и отраженные электроны наблюдаются под углом, равным углу падения. Соответствующее межплоскостное расстояние d = 0,24 нм. Преломлением электронных волн в кристалле пренебречь.

Ответ: $U = \frac{h^2n^2}{8d^2em\sin^2 j}$.

1.60. Насколько изменится длина волны де Бройля электрона, движущегося в вакууме со скоростью v = $6 \cdot 10^6$ м/с при попадании в металл, внутренний потенциал которого относительно вакуума U= 15 В?

Ответ: $\Delta l = \frac{h}{mv}\left(\frac{1}{\sqrt{1+(2eU)/(mv^2)}} - 1\right) = -0{,}079\,\mathring{A}$.

1.61. Показатель преломления n некоторого металла относительно вакуума для электронных волн с энергией E = 200 эВ равен 1,03. Определить внутренний потенциал металла.

Ответ: $U = \dfrac{E}{e(n^2 - 1)}$.

1.62. Найти показатель преломления n электронных волн, угол преломления и скорость электронов в металлической пластине при условии, что пучок электронов с энергией E = 120 эВ падает на ее поверхность под углом скольжения J = 45°. Внутренний потенциал пластины U = 12 В.

Отвт:

$$n = 1{,}048; \quad J' = \arcsin\left(\frac{\cos J}{n}\right) = 42{,}5^0; \quad \mathrm{v} = \sqrt{\frac{2(E + eU)}{m}} = 6{,}8 \cdot 10^6 \, \textit{м/с}.$$

1.63. На естественную грань некоторого монокристалла падает под углом 45° моноэнергетический пучок электронов. Наблюдение ведется под углом отражения, равным углу падения. При изменении ускоряющей разности потенциалов наблюдается последовательность максимумов отражения разных порядков. Определить величину показателя преломления, если известно, что при U=77,9 В имеет место максимум третьего порядка. Постоянная решетки кристалла d = 0,24 нм.

Ответ: $n = \sqrt{\dfrac{h^2 k^2}{8md^2 eU} + \cos^2 J} = 1{,}12$.

1.64. Угол падения и отражения пучка электронов от некоторой системы параллельных плоскостей кристалла равен 30°. Максимум отражения 4-го порядка наблюдается при ускоряющей разности потенциалов U = 101,8 В. Показатель преломления n электронных волн при этом равен 1,03. Вычислить величину межплоскостного расстояния, соответствующую данному отражению.

Ответ: $d = \dfrac{kh}{2\sqrt{2meU\left(n^2 - \cos^2 j\right)}}$.

1.65. При дифракции электронов с энергией E = 200 эВ на поликристаллической фольге диаметр дифракционного кольца 1-го порядка r = 3 см. Расстояние от фольги до экрана l = 15 см. Определить межплоскостное расстояние d кристаллической решетки фольги.

Ответ: $d = \dfrac{h}{\sqrt{2mE}} \dfrac{\sqrt{l^2 + r^2}}{2r} \approx 0{,}4 \, \textit{нм}$

1.66. Исходя из соотношения неопределенностей, показать, что электрон не может находиться внутри ядра.

1.67. Показать, что длина волны де Бройля укладывается на любой боровской орбите целое число раз.

1.68. Микрочастица с массой покоя m_0 находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной l с бесконечно высокими стенками. Оценить минимально возможную энергию частицы, если $\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \pi \hbar$.

Ответ: $E_{\min} = \dfrac{\pi^2 \hbar^2}{2 m_0 l^2}$.

1.69. Исходя из соотношения неопределенностей $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar / 2$, оценить минимальную энергию линейного гармонического осциллятора с собственной частотой ω.

Ответ: $E_{\min} = \dfrac{1}{2} \hbar \omega$.

1.70. Полагая для обоих электронов в атоме гелия неопределенность в положении, равной их расстоянию от ядра, оценить грубо минимально возможную энергию атома гелия и соответствующее расстояние электронов от ядра.

Ответ: $E_{\min} = -\dfrac{49}{256 \pi^2 \varepsilon_0^2} \dfrac{m_0 e^4}{\hbar^2} = -83$ *эВ*, $r \approx \dfrac{16 \pi \varepsilon_0 \hbar^2}{7 m_0 e^2} = 0{,}3 \cdot 10^{-10}$ *м*.

1.71. Частица массой m находится в одномерной прямоугольной яме шириной l с бесконечно высокими стенками. Оценить силу давления частицы на стенки ямы при минимально возможном значении энергии E_{min}.

Ответ: $\bar{F} = \dfrac{\pi^2 \hbar^2}{2 m_0 l^3}$.

1.72. Параллельный пучок электронов с энергией E падает нормально на диафрагму с узкой щелью, за которой на расстоянии l расположен экран. Оценить ширину щели, при которой эффективная ширина изображения на экране будет минимальной.

Ответ: $d > \dfrac{h}{\sqrt{2mE}}$.

1.73. Оценить величину неопределенности импульса электрона, запертого в одномерной потенциальной яме

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x \leq 0, \\ eEx, & x > 0, \end{cases}$$

где $E = 3 \cdot 10^9$ В/м, в том случае, когда энергия его имеет минимально возможное значение.

Ответ: $\Delta p \approx \sqrt[3]{\hbar m e E} = 3{,}58 \cdot 10^{-21}$ кг·*м/с*.

1.74. Микрочастица массой m движется в потенциальной яме $U = k|x|^3$. Оценить линейный размер области, в которой находится частица при минимально возможной энергии.

Ответ: $\Delta x \sim 2|x| = \sqrt[5]{\dfrac{8h^2}{3mk}}$.

1.75. Вычислить с помощью соотношения неопределенностей энергию основного состояния позитрония и оценить минимальную ошибку, которая допускается при определении этой энергии. Среднее время жизни позитрония τ=1,25·10^{-10} с.
(Примечание: позитронием называется связанная система электрон-позитрон).

Ответ: $E_{\min} = -\dfrac{me^4}{64p^2 e_0^2 \mathbf{h}^2} = -6{,}8\,\text{эВ},\ \Delta E \approx \dfrac{h}{t} = 1{,}66 \cdot 10^{-5}\,\text{эВ}.$

1.76. Исходя из соотношения неопределенностей, оценить линейные размеры атомов и ядер, полагая, что энергия связи E электрона в атоме порядка 10 эВ, а нуклона в ядре – 1 МэВ.

Ответ: 0.6·10^{-10} *м и* 0,5·10^{-14} *м соответственно*.

2.ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

2.1. Краткие теоретические сведения

2.1.1. Основные понятия. Квантово-механический принцип суперпозиции состояний

Так же, как и в классической механике, состояние движения микрочастицы характеризуется динамическими переменными – координатами, импульсом, моментом импульса, кинетической энергией (потенциальная энергия задается как результат действия силовых полей). При этом спектр значений той или иной динамической переменной может быть непрерывным, дискретным или смешанным. Так, спектр значений координаты непрерывен, спектр значений момента импульса электрона в атоме – дискретный, энергии – может быть как непрерывным, так и дискретным. Кроме того, не любая из комбинаций динамических переменных может быть одновременно измерена с одинаковой степенью точности – так, соотношение неопределенностей Гейзенберга (1.20) связывает сопряженные координату и импульс. В классической механике все динамические переменные определены в любой момент времени, если известен закон движения $\vec{r}(t)$. Отсутствие функциональной связи между положением частицы в пространстве и ее импульсом означает отсутствие понятия **«движение по траектории»** в микромире, т.е. отсутствие закона движения. Аналогом закона движения в микромире является волновая функция $\psi(\vec{r},t)$, знание которой позволяет получить всю возможную информацию о состоянии движения микрочастицы, причем эта информация носит вероятностный характер. Так, свободно движущейся частице можно поставить в соответствие плоскую монохроматическую волну де Бройля

$$\psi(\vec{r},t) = Ce^{-i/\hbar(Et-\vec{p}\vec{r})}. \tag{2.1}$$

В общем случае волновая функция вводится так, что квадрат ее модуля определяет плотность вероятности локализации частицы:

$$dW(\vec{r},t) = |\psi(\vec{r},t)|^2 dV = \psi \cdot \psi^* dV. \tag{2.2}$$

Волновая функция определена с точностью до постоянного множителя. Принимая вероятность обнаружения частицы в любой точке доступного объема равной единице, всегда можно подобрать нормировочную постоянную так, что

$$\int_V \psi^* \cdot \psi \, dV = 1. \tag{2.3}$$

Одним из основных принципов, лежащих в основе квантовой механики, является принцип суперпозиции состояний, который формулируется следующим образом.

Если частица может находиться в состоянии, описываемом волновой функцией y_1, и может находиться в состоянии, описываемом волновой функцией y_2, то она может находиться и в состоянии y, являющемся линейной комбинацией состояний y_1 и y_2:

$$y = a_1 y_1 + a_2 y_2, \tag{2.4}$$

где a_1 и a_2 в общем случае комплексные постоянные.

В квантовой механике разрабатываются методы решения двух основных задач:

– получение максимально возможной информации о динамических характеристиках движения микрочастицы по известной волновой функции, описывающей рассматриваемое состояние;

– нахождение вида волновой функции при движении микрочастицы в конкретном силовом поле.

2.1.2. Основные положения

Пусть состояние частицы характеризуется некоторой физической величиной F, являющейся динамической переменной. Для определенности будем считать, что спектр этой величины дискретный, т.е. F может принимать значения F_1, F_2,…F_n,…, называемые собственными значениями величины F. Состояния, измерения в которых величины F дают достоверные значения F_1, или F_2, … или F_n, … , называются собственными состояниями, а соответствующие волновые функции этих состояний $y_{F_1}, y_{F_2}, \ldots y_{F_n}, \ldots$, – собственными функциями. В соответствии с квантово-механическим принципом суперпозиции состояний очевидно, что произвольное состояние y может быть представлено в виде суперпозиции собственных состояний величины F:

$$y = \sum_n a_n y_{F_n}. \tag{2.5}$$

Если y и y_{F_n} нормированы на единицу, т.е. выполняется условие (2.3) и

$$\int y^*_{F_n} \cdot y_{F_m} dV = \begin{cases} 1 & \text{при } m = n, \\ 0 & \text{при } m \neq n, \end{cases} \tag{2.6}$$

$$a_n = \int y^*_{F_n} \cdot y \cdot dV. \tag{2.7}$$

В квантовой механике постулируется, что вероятность получения значения F_n при измерении величины F в произвольном состоянии y определяется квадратом модуля соответствующего коэффициента a_n:

$$W(F_n) = W_{F_n} = |a_n|^2 = a_n^* \cdot a_n. \tag{2.8}$$

Тогда среднее значение физической величины F определяется соотношением:

$$\langle F \rangle = \sum_n F\,W(F_n)\,. \qquad (2.9)$$

Т.к. спектр значений координат непрерывен, то очевидно, что средние значения координат и любых функций координат могут быть представлены интегральными соотношениями вида:

$$\overline{x} = \int x \cdot dW(x) = \int x\psi^*(x)\psi(x)dx = \int \psi^*(x)x\psi(x)dx\,,$$

$$\overline{f(x)} = \int f(x)dW(x) = \int f(x)\psi^*(x)\psi(x)dx = \int \psi^*(x)f(x)\psi(x)dx\,. \qquad (2.10)$$

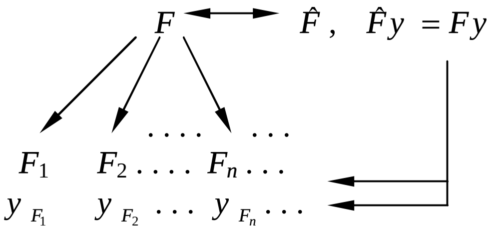
Если ввести математический оператор $\hat{F}$ такой, что $\hat{F}\psi_{F_n} = F_n\psi_{F_n}$, то

$$\overline{F} = \int \psi^*(\hat{F}\psi)dV\,. \qquad (2.11)$$

В свою очередь, если известен конкретный вид оператора $\hat{F}$, то собственные функции ψ_{F_n} и собственные значения F_n можно найти, решив уравнение

$$\hat{F}\psi = F\psi\,. \qquad (2.12)$$

Решить уравнение (2.12) означает найти такое значения F_n, при которых это уравнение имеет решение, а затем для этих значений определить собственные функции ψ_{F_n}. В целом, система связей $F - F_n - \psi_{F_n}$ может быть представлена следующей схемой:



$$\hat{F}\psi_{F_n} = F_n\psi_{F_n}$$

2.1.3. Математический аппарат квантовой механики

В квантовой механике используются линейные самосопряженные операторы. Условие линейности оператора $\hat{f}$ заключается в том, что

$$\hat{f}(a_1u(x) + a_2v(x)) = a_1\hat{f}u(x) + a_2\hat{f}v(x)\,, \qquad (2.13)$$

где a_1 и a_2 – в общем случае комплексные постоянные

Оператор $\hat{f} = \hat{f}_1 + \hat{f}_2$ называется суммой операторов, если

$$\hat{f}u(x) = (\hat{f}_1 + \hat{f}_2)u(x) = \hat{f}_1u(x) + \hat{f}_2u(x)\,. \qquad (2.14)$$

Оператор $\hat{f} = \hat{f}_1\hat{f}_2$ называется произведением операторов, если

$$\hat{f}u(x) = \hat{f}_1\hat{f}_2u(x) = \hat{f}_1(\hat{f}_2u(x))\,. \qquad (2.15)$$

Следует отметить, что произведение операторов в общем случае не коммутативно, т.е. $\hat{f}_1\hat{f}_2 \neq \hat{f}_2\hat{f}_1$. Оператор

$$\left[\hat{f}_1\hat{f}_2\right] = \hat{f}_1\hat{f}_2 - \hat{f}_2\hat{f}_1 \qquad (2.16)$$

называется коммутатором операторов $\hat{f}_1$ и $\hat{f}_2$. Если коммутатор равен нулю, то операторы $\hat{f}_1$ и $\hat{f}_2$ коммутируют, в противном случае – не коммутируют.

Если действие оператора $\hat{f}$ на функцию *u(x)* сводится к ее умножению на число λ

$$\hat{f}u(x) = l\,u(x), \qquad (2.17)$$

то это число называется собственным числом оператора $\hat{f}$, а функция *u(x)* – собственной функцией оператора $\hat{f}$, принадлежащей собственному значению λ. При решении краевой задачи Штурма-Лиувилля на интервале $a \leq x \leq b$ уравнению (2.17) удовлетворяет множество значений λ_m и множество соответствующих им собственных функций u_m так, что

$$\hat{f}u_m = l_m u_m. \qquad (2.18)$$

Если каждому значению λ_m соответствует одна собственная функция u_m, то эти функции образуют полную систему ортогональных функций, удовлетворяющих условию

$$\int_a^b u_m^* u_n dx = \begin{cases} 1, & m = n, \\ 0, & m \neq n. \end{cases} \qquad (2.19)$$

В выражении (2.19) собственные функции нормированы на единицу. Такая нормировка возможна, т.к. собственные функции определены с точностью до постоянного множителя. Любая функция $F(x)$, ограниченная и интегрируемая на интервале (ab) может быть разложена в функциональный ряд по собственным функциям $u_n(x)$:

$$\Phi(x) = \sum_n c_n u_n, \qquad c_n = \int_a^b u_n^* \Phi(x) dx. \qquad (2.20)$$

Если одному собственному значению λ_n соответствуют несколько собственных функций u_{ni} (i = 1, 2, …, s), то говорят, что значение λ_n *s*-кратно вырождено. При этом функции u_{ni} ортогональны остальным функциям системы u_m $(m \neq n)$, но не ортогональны между собой. Функции u_{ni} можно ортогонализовать линейным преобразованием

$$c_k = \sum_{i=1}^{s} a_i u_{mi} \qquad (k = 1, 2, ..., s). \qquad (2.21)$$

Условие самосопряженности используемых в квантовой механике линейных операторов

$$\int u^*(x) \cdot (\hat{f}v(x)) dx = \int v(x) \cdot (\hat{f}^* u^*(x)) dx \qquad (2.22)$$

обеспечивает действительность их собственных значений (значения физических величин не могут быть представлены комплексными числами).

2.1.4. Операторы физических величин, их собственные значения и собственные функции

Конкретный вид операторов физических величин может быть получен из общефизических соображений. Так, в соответствии с вероятностной трактовкой волновой функции (2.2) и выражением (2.10) для среднего значения координаты и произвольной функции координат оператор координаты совпадает с самой координатой, т.е.

$$\hat{x} = x, \quad \hat{y} = y, \quad \hat{z} = z, \text{ или } \hat{\vec{r}} = \vec{r}. \tag{2.23}$$

Таким образом, спектр значений координат непрерывный, а нормированной собственной функцией координаты является дельта-функция Дирака $\delta(x - x_0)$.

Нетрудно убедиться в том, что действие оператора $-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$ на волну де Бройля, приводит к умножению волновой функции (2.1) на проекцию импульса p_x. При этом никаких ограничений на значения проекции импульса не налагается. Следовательно, операторы проекций и вектора импульса имеют вид:

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \qquad \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \qquad \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}, \qquad \hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}, \tag{2.24}$$

спектр значений импульса – непрерывен. Собственной функцией оператора проекции импульса $\hat{p}_x$ является плоская волна де Бройля

$$\psi_{p_x}(x) = Ce^{i(p_x x)/\hbar}. \tag{2.25}$$

Для непрерывного спектра значений проекции импульса нормировка осуществляется на δ-функцию (см. Приложение Б) так, что $\int\limits_{-\infty}^{\infty} \psi^*_{p'_x}(x)\cdot\psi_{p_x}(x)dx = \delta(p'_x - p_x)$.

Тогда

$$C^2\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(p_x - p'_x)x}dx_x = C^2 2\pi\hbar\delta(p_x - p'_x) = \delta(p_x - p'_x) \text{ и } C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}.$$

Аналогичными (с соответствующими изменениями) являются и собственные функции операторов двух других проекций импульса. Для оператора вектора импульса

$$\psi(\vec{r}) = Ce^{i(\vec{p}\vec{r})/\hbar}. \tag{2.26}$$

Очевидно, что две физические величины могут одновременно иметь определенные значения (могут быть одновременно измерены с одинаковой степенью точности), если состояние микрочастицы является общим собственным для этих величин. При этом операторы, изображающие эти физические величины, коммутируют между собой. Таким образом, условие одновременной измеримости двух величин, изображаемых операторами $\hat{F}_1$ и $\hat{F}_2$, является

$$\left[\hat{F}_1\hat{F}_2\right]=0. \qquad (2.27)$$

Для сопряженных координаты и проекции импульса $\left[\hat{p}_x x\right]=-i\hbar$. Отсюда следует точное выражение для соотношения неопределенностей:

$$\overline{\Delta x^2}\cdot\overline{\Delta p_x^2}\geq\frac{\hbar^2}{4}. \qquad (2.28)$$

Операторы несопряженных координат и проекции импульса коммутируют, поэтому несопряженные координата и проекция импульса могут быть одновременно определены.

Т.к. в классической механике кинетическая энергия $T=\dfrac{p^2}{2m}$, а в квантовой механике $\hat{p}^2=-\hbar^2\Delta$, где $\Delta=\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2}{\partial y^2}+\dfrac{\partial^2}{\partial z^2}$ – оператор Лапласа, то оператор кинетической энергии

$$\hat{T}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta. \qquad (2.29)$$

Потенциальная энергия является функцией координат, поэтому оператор потенциальной энергии совпадает с самой потенциальной энергией:

$$\hat{U}(x,y,z)=U(x,y,z). \qquad (2.30)$$

Функция Гамильтона в классической механике (полная механическая энергия) $H=T(\vec{p})+U(\vec{r},t)$ переходит в квантовой механике в оператор Гамильтона (гамильтониан)

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U(\vec{r},t). \qquad (2.31)$$

Т.к. кинетическая энергия является функцией импульса, а потенциальная – функцией координат, то в микромире невозможно одновременное измерение кинетической и потенциальной энергий; можно говорить лишь о полной энергии. Измерениям подлежит лишь полная энергия *E*, возможные значения которой определяются решением уравнения

$$\hat{H}\psi=E\psi. \qquad (2.32)$$

При этом, в зависимости от конкретного вида потенциальной функции $U(\vec{r},t)$, полная энергия может иметь как непрерывный, так и дискретный или смешанный спектр значений.

По аналогии с классическим выражением оператор момента импульса определяется выражением:

$$\vec{L}=\left[\vec{r}\vec{p}\right]. \qquad (2.33)$$

Нетрудно убедиться в том, что операторы любых двух проекций момента импульса не коммутируют между собой, но одна из проекций (например, $\hat{L}_z$) коммутирует с модулем момента импульса, т.е.

$$\left[\hat{L}^2, \hat{L}_z\right] = 0 . \qquad (2.34)$$

Собственные функции и собственные значения оператора $\hat{L}^2$ определяются решением уравнения в частных производных $\hat{L}^2\psi = L^2\psi$, которое допускает разделение переменных в сферических координатах. При этом операторы $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_z$ имеют вид:

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}, \qquad \hat{L}^2 = -\hbar^2\Delta_{\theta,\varphi} , \qquad (2.35)$$

где $\Delta_{\theta\varphi}$ – угловая часть оператора Лапласа (см. Приложение В).

Уравнения (2.35) имеют решения при

$$L_z = m\hbar \text{ и } L^2 = \hbar^2 l(l+1) , \qquad (2.36)$$

(m = 0, ±1, ±2, …±l, l = 0, 1, 2, …).

Собственными функциями $\hat{L}^2$ являются сферические функции

$$\psi(\theta,\varphi) = \psi_{lm}(\theta,\varphi) = Y_{lm} = P_{ll}^{|m|}(\cos\theta)\cdot e^{im\varphi} , \qquad (2.37)$$

где $P_l^{|m|}$ – присоединенные полиномы Лежандра (см. Приложение Г). Таким образом, каждому значению l (модулю момента импульса) соответствует (2l+1) значений m (проекций момента импульса, определяющих его ориентацию в пространстве). Квантовое число l называется орбитальным квантовым числом, а m – магнитным квантовым числом. В свою очередь, значения квантовых чисел l и m однозначно определяют собственные состояния.

Полученные результаты допускают геометрическую интерпретацию: момент импульса можно представить в виде прецессирующего вектора определенной длины, проекция которого на на ось z (ось вращения) определена в любой момент времени. На рис.2.1 представлена такая модель вектора момента импульса для орбитального квантового числа l = 1 с его тремя возможными ориентациями (m = -1, 0, 1)

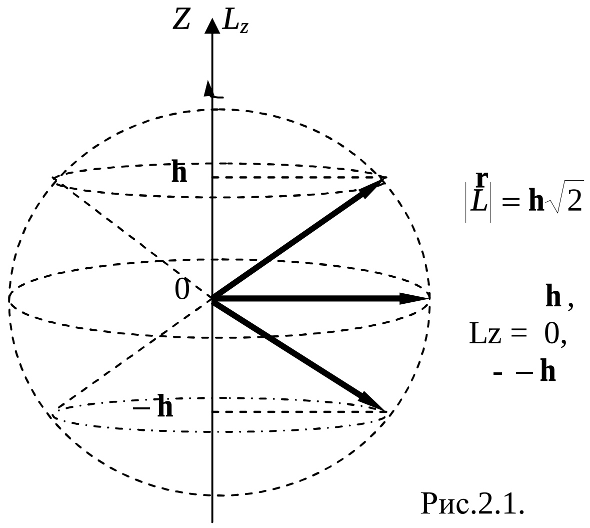


Рис.2.1.

2.1.5. Уравнение Шредингера. Стационарное уравнение Шредингера и стационарные состояния

Так же, как и в классической механике, в микромире справедлив принцип причинности, который в квантовой механике формулируется следующим образом: **состояние частицы в начальный момент времени** $\psi(\vec r,0)$ **однозначно определяет ее состояние в любой последующий момент времени** $\psi(\vec r,t)$**, если известен конкретный вид поля** $U(\vec r,t)$**, в котором рассматривается движение.** Состояние $\psi(\vec r,t)$ определяется решением **уравнения Шредингера** при заданных граничных и начальном условиях:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat H\psi\ ,\ \hat H=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U(\vec r,t). \qquad (2.38)$$

Если движение происходит в стационарном поле $U=U(\vec r)$, уравнение (2.38) допускает разделение пространственных и временной переменных. В этом случае решение может быть представлено в виде

$$\psi(\vec r,t)=\psi(\vec r)\varphi(t). \qquad (2.39)$$

Подстановка решения (2.39) в (2.38) приводит к двум уравнениям:

$$i\hbar\frac{1}{\varphi}\frac{d\varphi}{dt}=\frac{1}{\psi(\vec r)}\hat H\psi(\vec r)=const. \qquad (2.40)$$

Сравнивая (2.40) с (2.32), эти уравнения можно записать в виде:

$$\frac{d\varphi}{\varphi}=-\frac{i}{\hbar}Edt, \qquad (2.41)$$

$$\hat H\psi=E\psi\ . \qquad (2.42)$$

Уравнение (2.42) называется стационарным уравнением Шредингера и фактически является уравнением на нахождение собственных функций и собственных значений гамильтониана (энергетического спектра). Пусть решениям уравнения (2.42) соответствует дискретный энергетический спектр E_1, E_2, …, E_n, … и система соответствующих собственных функций $\psi_1,\psi_2,\ldots,\psi_n,\ldots$ Тогда каждому значению E_n соответствует $\varphi_n=e^{-\frac{i}{\hbar}E_nt}$, и частное решение уравнения Шредингера (2.38) имеет вид:

$$\psi_n(\vec r,t)=\psi_n(\vec r)e^{-\frac{i}{\hbar}E_nt}. \qquad (2.43)$$

Состояние, описываемое волновой функцией вида (2.43), называется n-ым стационарным, характеризуется определенным значением энергии E_n, вероятность локализации (квадрат модуля волновой функции) не зависит от времени и средние значения динамических переменных также не зависят от времени.

Общее решение уравнения (2.38) представляет собой суперпозицию стационарных состояний

$$\psi(\vec r,t)=\sum_n C_n\psi_n(\vec r)e^{-\frac{i}{\hbar}E_nt}, \qquad (2.44)$$

где коэффициенты C_n определяются из начального условия соотношением

$$C_n=\int\psi_n^*(\vec r)\psi(\vec r,0)dV\ . \qquad (2.45)$$

Здесь, по-прежнему, предполагается, что собственные функции ψ_n нормированы на единицу.

В квантовой механике, как и в классической, вводится понятие интегралов движения. Интегралом движения является динамическая переменная *F*, оператор полной производной по времени которой равен нулю:

$$\frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}\hat{F}\right] = 0. \qquad (2.46)$$

Если оператор $\hat{F}$ явно от времени не зависит, то это условие приобретает вид:

$$\left[\hat{H}\hat{F}\right] = 0, \qquad (2.47)$$

т.е. физическая величина *F* является квантово-механическим интегралом движения, если оператор, ее изображающий, коммутирует с гамильтонианом. При этом среднее значение физической величины, являющейся квантово-механическим интегралом движения, не зависит от времени. В стационарных состояниях квантово-механическими интегралами движения являются полная механическая энергия, импульс и момент импульса.

2.2. Примеры решения задач

Задача 1. Показать, что оператор проекции момента импульса $\hat{L}_z = -i\hbar\frac{d}{d\varphi}$, где $0 \le \varphi \le 2\pi$, является самосопряженным.

<u>Решение</u>

Рассмотрим интеграл

$$\int_0^{2\pi} \psi_1^* \left(-i\hbar\frac{d\psi_2}{d\varphi}\right) d\varphi\ , \qquad (1)$$

где ψ_1 и ψ_2 – некоторые волновые функции аргумента φ, причем из физических соображений очевидно, что $\psi_1(0) = \psi_1(2\pi)$ и $\psi_2(0) = \psi_2(2\pi)$. Возьмем интеграл (1) по частям:

$$\int_0^{2\pi} \psi_1^* \left(-i\hbar\frac{d\psi_2}{d\varphi}\right) d\varphi = -i\hbar\psi_1^*\psi_2\Big|_0^{2\pi} + \int_0^{2\pi} \psi_2 \left(i\hbar\frac{d\psi_1^*}{d\varphi}\right) d\varphi = \int_0^{2\pi} \psi_2 \left(i\hbar\frac{d\psi_1^*}{d\varphi}\right) d\varphi\ .$$

Но полученный результат представляет собой условие самосопряженности

$$\int_0^{2\pi} \psi_1^* \left(\hat{L}_z\psi_2\right) d\varphi = \int_0^{2\pi} \psi_2 \left(\hat{L}_z^*\psi_1^*\right) d\varphi\ .$$

Задача 2. Возвести в квадрат оператор $\frac{1}{x}\frac{d}{dx}x$.

Решение

Рассмотрим действие оператора $\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}x\right)^2$ на некоторую функцию y:

$$\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}x\right)^2 y = \left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}x\right)\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}x\right)y = \left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}x\right)\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}(xy)\right) =$$

$$= \left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}x\right)\left(\frac{1}{x}y + \frac{dy}{dx}\right) = \frac{1}{x}\frac{dy}{dx} + \frac{1}{x}\frac{d}{dx}\left(x\frac{dy}{dx}\right) =$$

$$= \frac{1}{x}\frac{dy}{dx} + \frac{1}{x}\frac{dy}{dx} + \frac{d^2y}{dx^2} = \frac{2}{x}\frac{dy}{dx} + \frac{d^2y}{dx^2} = \left(\frac{2}{x}\frac{d}{dx} + \frac{d^2}{dx^2}\right)y$$

Таким образом, окончательно имеем $\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}x\right)^2 = \frac{2}{x}\frac{d}{dx} + \frac{d^2}{dx^2}$.

Задача 3. Показать, что две проекции момента импульса, например L_x и L_y, одновременно не могут иметь определенные значения.

Решение

Найдем коммутатор операторов $\hat{L}_x$ и $\hat{L}_y$ $\left[\hat{L}_x \hat{L}_y\right] = \hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x$. Учтем, что по определению

$$L_x = yp_z - zp_y, \qquad L_y = zp_x - xp_z.$$

Тогда

$$\hat{L}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, \qquad \hat{L}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z.$$

Вычислим произведения операторов $\hat{L}_x\hat{L}_y$ и $\hat{L}_y\hat{L}_x$, учитывая, что произведение несопряженных координат и импульсов коммутативно, т.е. несопряженные координаты и импульсы перестановочны:

$$\hat{L}_x\hat{L}_y = (y\hat{p}_z - z\hat{p}_y)(z\hat{p}_x - x\hat{p}_z) = y\hat{p}_x\hat{p}_z z - z^2\hat{p}_x\hat{p}_y - yx\hat{p}_z^2 + x\hat{p}_y z\hat{p}_z,$$

$$\hat{L}_y\hat{L}_x = (z\hat{p}_x - x\hat{p}_z)(y\hat{p}_z - z\hat{p}_y) = y\hat{p}_x z\hat{p}_z - xy\hat{p}_z^2 - z^2\hat{p}_x\hat{p}_y + x\hat{p}_y\hat{p}_z z.$$

Разность этих произведений

$$\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = y\hat{p}_x\hat{p}_z z + x\hat{p}_y z\hat{p}_z - y\hat{p}_x z\hat{p}_z - x\hat{p}_y\hat{p}_z z = y\hat{p}_x(\hat{p}_z z - z\hat{p}_z) - xpy(\hat{p}_z z - z\hat{p}_z) =$$

$$= (\hat{p}_z z - z\hat{p}_z)(y\hat{p}_x - x\hat{p}_y) = \hat{L}_z(z\hat{p}_z - \hat{p}_z z).$$

Но $z\hat{p}_z - \hat{p}_z z = [z, \hat{p}_z] = i\mathbf{h}$. Следовательно, $\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = i\mathbf{h}\hat{L}_z$.

Т.к. коммутатор операторов $\hat{L}_x$ и $\hat{L}_y$ не равен нулю, то эти проекции момента импульса не могут одновременно иметь определенные значения. Аналогичные соотношения можно получить и для любой другой пары проекций момента импульса. В общем случае

$$\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = i\mathbf{h}\hat{L}_z, \qquad \left[\hat{L}_y, \hat{L}_z\right] = i\mathbf{h}\hat{L}_x, \qquad \left[\hat{L}_z, \hat{L}_x\right] = i\mathbf{h}\hat{L}_y .$$

Полученные выражения носят название перестановочных соотношений для проекций момента импульса.

Задача 4. Найти собственные функции и собственные значения оператора $\left(x + \dfrac{d}{dx}\right)$ на интервале $-\infty < x < \infty$.

<u>Решение</u>

Уравнение для нахождения собственных функций и собственных значений имеет вид:

$$xy + \frac{dy}{dx} = l\,y \ . \qquad (1)$$

Разделяя переменные в этом уравнении, получаем:

$$\frac{dy}{y} = (l - x)dx .$$

Интегрирование этого уравнения дает

$$y = Ce^{l x - x^2/2} . \qquad (2)$$

Это решение удовлетворяет требованию ограниченности $y(x)$ при любых вещественных и комплексных значениях l. Следовательно, собственными функциями оператора $\left(x + \dfrac{d}{dx}\right)$ являются функции вида (2) при любых собственных значениях l.

Задача 5. Определить среднее значение динамической переменной, описываемой оператором $\hat{F} = -\mathbf{h}^2 \dfrac{d^2}{dj^2}$, в состоянии $y = A\sin^2 j$.

<u>Решение</u>

Для нахождения среднего значения $\langle F \rangle$ будем использовать выражением (2.14), для чего необходимо прежде всего выполнить нормировку волновой функции, описывающей рассматриваемое состояние. Условие нормировки

$$A^2\int_0^{2\pi}\sin^4\varphi\cdot d\varphi=1. \qquad (1)$$

Рассмотрим интеграл

$$I=\int_0^{2\pi}\sin^4\varphi\cdot d\varphi\ . \qquad (2)$$

Чтобы взять этот интеграл, будем понижать степень sinφ в подынтегральном выражении.

$$\sin^4\varphi=\frac{1}{4}(1-\cos 2\varphi)^2=\frac{1}{4}(1-2\cos 2\varphi+\cos^2 2\varphi)=\frac{1}{4}-\frac{1}{2}\cos 2\varphi+\frac{1}{8}+\frac{1}{8}\cos 4\varphi\ .$$

Тогда $I=\frac{3}{8}\int_0^{2\pi}d\varphi-\frac{1}{2}\int_0^{2\pi}\cos 2\varphi\cdot d\varphi+\frac{1}{8}\int_0^{2\pi}\cos 4\varphi\cdot d\varphi=\frac{3\pi}{4}$ и $A^2=\frac{4}{3\pi}$.

$$\text{Т.к. } \bar{F}=\int_0^{2\pi}A\sin^2\varphi\cdot\left(-\hbar^2\frac{d^2}{d\varphi^2}(A\sin^2\varphi)\right)d\varphi=-\hbar^2A^2 2\int_0^{2\pi}\sin^2\varphi\cos 2\varphi\cdot d\varphi\ .$$

Осуществляя, как и ранее, понижение степени синуса, а затем косинуса в подынтегральном выражении, получаем:

$$\bar{F}=\hbar^2\pi A^2=\frac{4}{3}\hbar^2.$$

Задача 6. Определить собственные значения оператора $\hat{L}_z$ и их вероятности для частицы, находящейся в состоянии $\psi(\varphi)=A(1+\cos\varphi)^2$.

<u>Решение</u>

Прежде всего определим постоянную A из условия нормировки

$$A^2\int_0^{2\pi}(1+\cos\varphi)^4 d\varphi=1.$$

Подынтегральная функция

$$(1+\cos\varphi)^4=1+4\cos^2\varphi+\cos^4\varphi+4\cos\varphi+2\cos^2\varphi+4\cos^3\varphi=$$

$$=4+3\cos 2\varphi+4\cos\varphi+4(1-\sin^2\varphi)\cos\varphi+\frac{1}{4}(1+\cos 2\varphi)^2=$$

$$=\frac{17}{4}+\frac{7}{2}\cos 2\varphi+8\cos\varphi-4\sin^2\varphi\cos\varphi+\frac{1}{8}+\frac{1}{8}\cos 4\varphi=$$

$$=\frac{35}{8}+8\cos\varphi+\frac{7}{2}\cos 2\varphi+\frac{1}{8}\cos 4\varphi-4\sin^2\varphi\cos\varphi.$$

Все интегралы от тригонометрических функций аргументов φ, 2φ и 4φ в симметричных пределах от 0 до 2π равны нулю, поэтому $A^2\frac{35\pi}{4}=1$, откуда

$A^2 = \dfrac{4}{35\pi}$. Следовательно, нормированная волновая функция заданного состояния имеет вид:

$$\psi(\varphi) = \frac{2}{\sqrt{35\pi}}(1+\cos\varphi)^2 .$$

Разложим ψ(φ) в ряд по нормированным собственным функциям оператора $\hat{L}_z$:

$$\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} , \; (m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots).$$

При этом учтем, что в соответствии с формулой Эйлера $\cos\varphi = \dfrac{1}{2}(e^{i\varphi} + e^{-i\varphi})$. Тогда

$$\psi(\varphi) = \frac{2}{\sqrt{35\pi}}(1+2\cos\varphi+\cos^2\varphi) = \frac{2}{\sqrt{35\pi}}\left(\frac{3}{2}+2\cos\varphi+\frac{1}{2}\cos 2\varphi\right)=$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{35\pi}}e^{-2i\varphi} + \frac{2}{\sqrt{35\pi}}e^{-i\varphi} + \frac{3\sqrt{2}}{\sqrt{35}} + \frac{2}{\sqrt{35\pi}}e^{i\varphi} + \frac{1}{2\sqrt{35\pi}}e^{2i\varphi} =$$

$$= \sqrt{\frac{1}{70}}\psi_{-2}(\varphi) + \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{35}}\psi_{-1}(\varphi) + \frac{3\sqrt{2}}{\sqrt{35}}\psi_0(\varphi) + \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{35}}\psi_1(\varphi) + \sqrt{\frac{1}{70}}\psi_2(\varphi).$$

Т.к. вероятность собственных значений определяется квадратом модулей значений коэффициентов при соответствующих собственных функциях, а квантовое число m в выражении для собственных функций определяет значение проекции момента импульса, то

$$\psi_{\pm 2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\pm 2i\varphi}, \qquad W_{\pm 2} = W(L_{z,\pm 2}) = \frac{1}{70}, \qquad L_{z,\pm 2} = \pm 2\hbar;$$

$$\psi_{\pm 1} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\pm i\varphi}, \qquad W_{\pm 1} = W(L_{z,\pm 1}) = \frac{8}{35}, \qquad L_{z,\pm 1} = \pm\hbar;$$

$$\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}, \qquad W_0 = W(L_0) = \frac{18}{35}, \qquad L_0 = 0.$$

Проверкой правильности полученных результатов может служить условие нормировки для W_m: $\sum\limits_m W_m = \sum\limits_m |a_m|^2 = 1$. Действительно,

$$2\frac{1}{70} + 2\frac{8}{35} + \frac{18}{35} = 1.$$

Задача 7. Найти общее решение уравнения Шредингера для свободной частицы. Определить волновую функцию частицы в произвольный момент времени $t > 0$, если при $t = 0$ $\psi(x,0) = \sqrt{\dfrac{2}{\pi\hbar}}\sin\left(\dfrac{xp_0}{\hbar}\right)$.

Решение

Введем систему координат так, что ось Ox совпадает с направлением движения частицы. Тогда гамильтониан частицы имеет вид:

$$\hat{H} = -\frac{\mathbf{h}^2}{2n}\frac{d^2}{dx^2}$$

(т.к. движение свободное, то $U(x) = 0$), а равнение Шредингера

$$i\mathbf{h}\frac{\partial y\,(x,t)}{\partial t} = -\frac{\mathbf{h}^2}{2m}\frac{\partial^2 y\,(x,t)}{\partial t^2}. \qquad (1)$$

Подставляем решение в виде $y\,(x,t) = y\,(x) j\,(r)$ в уравнение (1) и разделяем переменные:

$$i\mathbf{h}\frac{dj\,(t)}{j\,(t)} = Edt, \qquad -\frac{\mathbf{h}^2}{2m}\frac{d^2 y\,(x)}{dx^2} = Ey\,(x). \qquad (2).$$

Второе из этих уравнений имеет решение вида $y\,(x) = e^{ikx}$, ограниченное на всем интервале $-\infty < x < \infty$ при $E = \frac{\mathbf{h}^2 k^2}{2m} > 0$. Тогда решение первого из уравнений (2):

$$j\,(t) = e^{-i\frac{E}{\mathbf{h}}t} = e^{-iwt}.$$

Таким образом, частное решение уравнения Шредингера для свободной частицы имеет вид волны де Бройля с частотой $w = \frac{E}{\mathbf{h}}$ и волновым числом $k = \pm\frac{\sqrt{2mE}}{\mathbf{h}}$:

$$y\,(x,t) = e^{-i(\frac{Et}{\mathbf{h}} - kx)}. \qquad (3)$$

Общее решение уравнения (1) представляет собой суперпозицию плоских волн де Бройля, которая в случае непрерывного энергетического спектра описывается интегралом Фурье:

$$y\,(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} C(k) e^{-i(wt-kx)} dk, \qquad (4)$$

где

$$C(k) = \frac{1}{2p}\int_{-\infty}^{\infty} y\,(x,0) e^{-ikx} dx. \qquad (5)$$

Для начальных условий задачи

$$C(k) = \frac{1}{2p}\sqrt{\frac{2}{p\,\mathbf{h}}}\int_{-\infty}^{\infty} \sin\left(\frac{xp_0}{\mathbf{h}}\right) e^{-ikx} dx. \qquad (6)$$

Учтем, что для свободно движущейся частицы $p_0 = \mathbf{h}k_0$ и, кроме того,

$$\sin k_0 x = \frac{1}{2i}(e^{ik_0 x} - e^{-ik_0 x}).$$

Тогда (см. Приложение Б)

$$C(k)=\frac{1}{4p\,i}\sqrt{\frac{2}{p\,\mathbf{h}}}\left(\int\limits_{-\infty}^{\infty}e^{i(k_0-k)x}dx-\int\limits_{-\infty}^{\infty}e^{i(k_0+k)x}dx\right)=\frac{1}{2i}\sqrt{\frac{2}{p\,\mathbf{h}}}\left(d\,(k-k_0)-d\,(k+k_0)\right)$$

и

$$y\ (x,t)=\frac{1}{2i}\sqrt{\frac{2}{p\,\mathbf{h}}}\left(\int\limits_{-\infty}^{\infty}d\,(k-k_0)e^{-i(wt-kx)}dx-\int\limits_{-\infty}^{\infty}d\,(k+k_0)e^{-i(wt-kx)}dx\right)=$$

$$\sqrt{\frac{2}{p\,\mathbf{h}}}e^{-iwt}\,\frac{e^{ik_0x}-e^{-ik_0x}}{2i}=\sqrt{\frac{2}{p\,\mathbf{h}}}e^{-iwt}\sin(k_0x)=\sqrt{\frac{2}{p\,\mathbf{h}}}e^{-i\frac{p_0^2}{2m\mathbf{h}}}\sin\left(\frac{p_0x}{\mathbf{h}}\right).$$

Полученный результат достаточно очевиден – т.к. движение свободное (силовое поле отсутствует), то импульс и кинетическая энергия частицы остаются неизменными.

2.3. Задания для самостоятельной работы

2.1. Показать, что если операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ – линейные, то сумма $\hat{A}+\hat{B}$ и произведение $\hat{A}\hat{B}$ этих операторов также являются линейными операторами.

2.2. Проверить, является ли оператор дифференцирования $\frac{\partial}{\partial x}$ самосопряженным.

2.3. Показать, что сумма произвольного оператора $\hat{A}$ и его сопряженного оператора $\hat{A}^*$ является самосопряженным оператором.

2.4. Доказать, что оператор проекции импульса $\hat{p}_x$ самосопряженный.

2.5. Доказать, что оператор проекции импульса $\hat{p}_x^2$ самосопряженный.

2.6. Проверить следующие операторные равенства:

а) $\left(\frac{d}{dx}x\right)^2=1+3x\frac{d}{dx}+x^2\frac{d^2}{dx^2}$; б) $x^2\frac{d}{dx}\frac{1}{x}=x\frac{d}{dx}-1$;

в) $\left(\frac{\partial}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial y}+\frac{\partial}{\partial z}\right)^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}+2\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}+2\frac{\partial^2}{\partial x\partial z}+2\frac{\partial^2}{\partial y\partial z}$.

2.7. Найти результат действия операторов $\frac{d^2}{dx^2}x^2\frac{d^2}{dx^2}x^2$ и $\left(\frac{d}{dx}x\right)^2$ на функции: а) $\sin x$; б) $\exp(2x)$.

Ответ: *а)* $(2-x^2)\sin x+4x\cos x;\qquad (1-x^2)\sin x+3x\cos x;$

б) $2(1+4x+2x^2)e^{2x};\qquad (1+6x+4x^2)e^{2x}$.

2.8. Доказать следующие правила коммутации:

а) $\left[\hat{L}_x,\hat{p}x\right]=0$; б) $\left[\hat{L}_x,\hat{p}_y\right]=i\hbar\hat{p}_z$; в) $\left[\hat{L}_x,\hat{p}_z\right]=-i\hbar\hat{p}_y$.

2.9. Доказать, что оператор квадрата момента импульса коммутирует с оператором кинетической энергии.

2.10. Показать справедливость следующих правил коммутации для гамильтониана $\hat{H}$ в потенциальном поле $U(x)$:

а) $\left[\hat{H},x\right]=-\frac{i\hbar}{m}\hat{p}_x$; б) $\left[\hat{H},\hat{p}_x\right]=i\hbar\frac{\partial U}{\partial x}$; в) $\left[\hat{H},\hat{p}_x^{\,2}\right]=2i\hbar\frac{\partial U}{\partial x}\hat{p}_x+\hbar^2\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$.

2.11. Найти собственные значения оператора $\hat{A}$, принадлежащие собственной функции ψ, если:

а) $\hat{A}=-\frac{d^2}{dx^2},\quad \psi=\sin 3x;$

б) $\hat{A}=-\frac{d^2}{dx^2}+4x^2,\quad \psi=e^{-x^2};$

в) $\hat{A}=\frac{d^2}{dx^2}+\frac{2}{x}\frac{d}{dx},\quad \psi=\frac{\sin a x}{x}$.

Ответ: а) A = 9; б) A = 2; в) $A = -\ a^2$.

2.12. Найти собственные функции и собственные значения операторов:

а) $-i\frac{d}{dx}$ при условии $\psi(x)=\psi(x+a)$, где a – постоянная величина;

б) $-\frac{d^2}{dx^2}$ если ψ = 0 при x = 0 и при x = l;

Ответ: *а)* $\psi_n=Ae^{i\lambda_n x},\qquad \lambda_n=\frac{2\pi}{a}n,\qquad n=0,\pm1,\pm2,\ldots;$

б) $\lambda_n=\frac{n^2\pi^2}{l^2},\qquad \psi_n=A\sin\frac{n\pi}{l}x,\qquad n=1,2,3,\ldots$

2.13. Найти собственные функции и собственные значения оператора $\dfrac{d^2}{dx^2}+\dfrac{2}{x}\dfrac{d}{dx}$.

Ответ: $y_{l}=A\dfrac{\sin\sqrt{l}\,x}{x}$, $\quad l>0$ *– любая произвольная величина.*

2.14. Найти собственные значения и принадлежащие им нормированные собственные функции следующих операторов:

а) $\hat{L}_z^2=-\mathbf{h}^2\dfrac{d^2}{dj^2}$; б) $\hat{F}=-i\mathbf{h}\dfrac{d}{dj}+a\sin j$,

где j - азимутальный угол.

Ответ: а) $L_z^2=m^2\mathbf{h}^2$, *где* m = 0, ±1, ±2…, $y_{m}(j)=(2p)^{-1/2}e^{imj}$;

б) $l=m\mathbf{h}$, *где* m = 0, ±1, ±2…, $y_{m}(j)=(2p)^{-1/2}e^{i(mj+\frac{a}{\mathbf{h}}\cos j)}$.

2.15. Найти собственное значение оператора квадрата момента импульса, соответствующее его собственной функции $Y(J,j)=A\cos j\,(1+2\sin J)$.

Ответ: $L^2=2\mathbf{h}^2$.

2.16. Возможные значения проекции момента импульса на произвольную ось равны $m\mathbf{h}$, где $m=-l,-l+1,...,l-1,l$. Показать, что в состоянии со значением l=2 среднее значение квадрата момента импульса $\overline{L^2}=6\mathbf{h}^2$.

2.17. Для частицы, находящейся в состоянии $y=A(2+e^{-ij})$, где j – азимутальный угол, найти среднее значение проекции момента импульса.

Ответ: $\overline{L}_z=\dfrac{\mathbf{h}}{5}$.

2.18. Определить собственные значения проекции момента импульса и их вероятности в состоянии $y=A\sin^2 j$. Найти среднее значение этой проекции.

Ответ: $L_z=0\pm2\mathbf{h}$; $\quad W_0=\dfrac{2}{3}$; $\quad W_{\pm1}=\dfrac{1}{6}$; $\quad \overline{L}_z=0$.

2.19. Частица находится в, состоянии которой описывается волновой функцией $y(x)=A\exp\left(x^2/a^2+ik_0x\right)$, где a и k_0 – постоянные. Найти средние значения координаты и импульса частицы, а также их среднеквадратичные отклонения. Проверить соотношение неопределенностей для координаты и сопряженного импульса.

Ответ: $\overline{x}=0$, $\quad \overline{p}_x=\mathbf{h}k_0$, $\quad \overline{\Delta x^2}=\dfrac{a^2}{2}$, $\quad \overline{\Delta p_x^2}=\dfrac{\mathbf{h}^2}{2a^2}$.

2.20. В момент времени $t=0$ свободная частица массы m имеет волновую функцию $\psi(x,0)=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{\frac{ip_0x}{\hbar}}$. Найти волновую функцию в момент времени $t>0$.

Ответ: $\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}(p_0x-\frac{p_0^2}{2m})}$.

2.21. Выяснить, сохраняются ли энергия, импульс, проекция и квадрат момента импульса при свободном движении частицы?

Ответ: Все величины являются квантово-механическими интегралами движения.

2.22. Какие из динамических переменных сохраняются при движении частицы: а) в однородном потенциальном поле $U(z)=az$; б) в центрально-симметричном потенциальном поле $U(r)$; в) в однородном переменном поле $U(z,t)=a(t)z$?

Ответ: а) сохраняются энергия E, *проекции импульса* p_x *и* p_y, *а также проекция момента импульса* L_z; *б) сохраняются энергия, проекция и квадрат момента импульса; в) сохраняются* p_x, p_y *и* L_z.

3. ОДНОМЕРНЫЕ КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИЕ ЗАДАЧИ

3.1. Краткие теоретические сведения

Движение микрочастицы в потенциальном поле $U(x)$ называется одномерным. При этом движение вдоль направлений z и y свободное, а движение вдоль x описывается волновой функцией $y(x)$, являющейся решением одномерного стационарного уравнения Шредингера

$$\frac{d^2y}{dx^2}+\frac{2m}{\mathbf{h}^2}\big(E-U(x)\big)y=0. \qquad (3.1)$$

При решении уравнения (3.1) должны выполняться так называемые естественные граничные условия: волновая функция $y(x)$ должна быть ограниченной, однозначной и непрерывной при любых значениях x, ее первая производная также должна быть непрерывной. Кроме того, $y(x)=0$ при $U(x)\to\infty$.

Для одномерного движения характерны следующие общие закономерности:

– при финитном движении энергетический спектр дискретный;

– при инфинитном движении энергетический спектр непрерывен;

– энергетические уровни дискретного энергетического спектра не вырождены;

– если n – порядковый номер энергетического уровня дискретного спектра, то число узлов (нулей) соответствующей волновой функции равно $(n-1)$.

К одномерным задачам относятся задачи о движении частицы в потенциальных ямах и при наличии потенциальных барьеров. В последнем случае, в отличие от классической механики, становится возможным прохождение (туннелирование) частицы сквозь потенциальный барьер даже если энергия частицы меньше высоты барьера. При этом ставится задача о нахождении коэффициентов прозрачности (вероятности прохождения через потенциальный барьер) D и отражения (вероятности отражения от барьера) R, причем коэффициенты D и R связаны очевидным соотношением $D+R=1$.

Важнейшей из одномерных задач является задача о квантовом гармоническом осцилляторе, т.е. о движении частицы массы m в потенциальном поле $U(x)=\dfrac{mw^2x^2}{2}$, где w – частота собственных колебаний осциллятора. Решениями стационарного уравнения Шредингера в этом случае являются функции

$$y_n(x)=Ce^{-x^2/2}H_n(x),\ n=0,1,2,\ldots, \qquad (3.2)$$

где $x=\sqrt{\dfrac{mw}{\mathbf{h}}}x$ – безразмерная переменная, и $H_n(x)=(-1)^n e^{x^2}\dfrac{d^n}{dx^n}e^{-x^2}$ – полиномы Эрмита. Соответствующие энергетические уровни определяются выражением:

$$E_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2}).\qquad(3.3)$$

Колебания с энергией $E_0 = \dfrac{\hbar\omega}{2}$ называются **нулевыми колебаниями**. Энергия нулевых колебаний представляет собой минимально возможное значение энергии осциллятора, допускаемое соотношением неопределенностей.

3.2. Примеры решения задач (стандартные одномерные задачи)

Задача 1. Частица массой m находится в потенциальной яме:

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x \le 0, \\ 0, & 0<x<a, \\ U_0, & x>a. \end{cases}$$

Найти собственные состояния и энергетический спектр частицы, если ее полная энергия E а) меньше U_0; б) больше U_0.

Решение

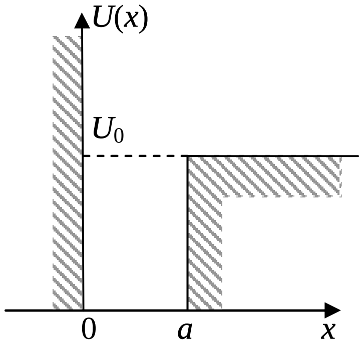


Рис.3.1

Из рис.3.1, видно, что имеют место две области значений *x*, в которых волновая функция отлична от нуля. Обозначим через ψ_1 волновую функцию в области $0<x<a$, где $U(x)=0$, и ψ_2 – в области $x \ge a$, где $U(x)=U_0$. Соответствующие стационарные уравнения Шредингера имеет вид

$$\begin{aligned} &\psi_1'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_1 = 0, \\ &\psi_2'' + \frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}\psi_2 = 0, \end{aligned}\qquad(1)$$

причем функции ψ_1 и ψ_2 должны удовлетворять граничным условиям

$$\psi_1(0)=0,\qquad \psi_1(a)=\psi_2(a),\qquad \psi_1'(a)=\psi_2'(a).\qquad(2)$$

Дальнейшее решение задачи зависит от характера движения частицы – финитного ($E<U_0$), или инфинитного ($E>U_0$).

а) Финитное движение ($E<U_0$)

С учетом того, что $E<U_0$, введем обозначения

$$\frac{2mE}{\hbar^2}=k^2 \text{ и } \frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}=g^2.\qquad(3)$$

Тогда уравнения (1) принимают вид:

$$y_1'' + k^2 y_1 = 0,$$
$$y_2'' - g^2 y_2 = 0.$$

Общими решениями этих уравнений являются функции

$$y_1 = A_1 \cos kx + B_1 \sin kx, \qquad y_2 = A_2 e^{gx} + B_2 e^{-gx}.$$

Из условия $y_1(0) = 0$ следует, что $A_1 = 0$ и $y_1 = B_1 \sin kx$. Кроме того, учитывая требование ограниченности волновой функции при $x \to \infty$, приходим к выводу, что необходимо положить $A_2 = 0$, и $y_2 = B_2 e^{-gx}$. Тогда на границе $x = a$

$$B_1 \sin ka = B_2 e^{-ga}, \tag{4}$$
$$kB_1 \cos ka = -g B_2 e^{-ga}. \tag{5}$$

Разделив уравнение (3) на уравнение (4), получаем

$$tg(ka) = -\frac{k}{g}.$$

Полученное дисперсионное уравнение не удобно для анализа. Поэтому преобразуем его – возведем в квадрат и прибавим к обеим частям полученного равенства единицу. Тогда

$$\frac{1}{\cos^2(ka)} = 1 + \frac{k^2}{g^2} \quad \text{или} \quad \cos^2(ka) = \frac{g^2}{k^2 + g^2}. \tag{6}$$

С использованием основного тригонометрического тождества уравнение (6) приводится к виду

$$\sin^2(ka) = 1 - \frac{g^2}{k^2 + g^2} = \frac{k^2}{k^2 + g^2} = \frac{E}{U_0}.$$

Окончательно получаем трансцендентное уравнение

$$\sin(ka) = \pm \frac{\hbar}{\sqrt{2mU_0}}(ka). \tag{7}$$

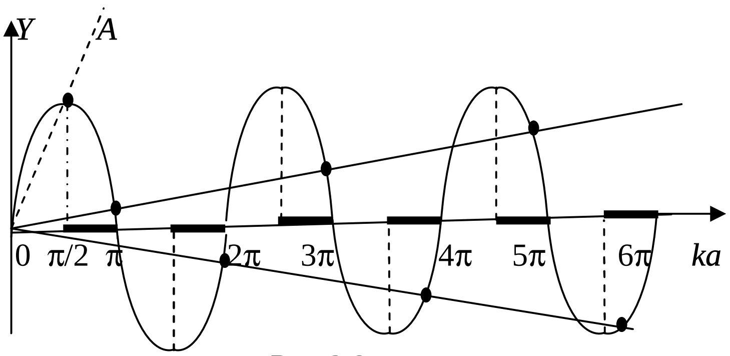


Рис.3.2

Графическое решение этого уравнения схематически представлено на рис.3.2. Корням уравнения k_1a, k_2a,… соответствуют пересечения кривых $Y_1 = \pm \frac{\hbar}{\sqrt{2mU_0}}(ka)$ и $Y_2 = \sin(ka)$ в четных четвертях ka, где $tg(ka) < 0$. Точкам на рис.3.2 соответствуют значения $k_i a$, определяющие дискретные уровни энергии (на рис.3.2 – точки). Точке пересечения прямой OA с синусоидой соответствует наименьший единственный корень уравнения (7) – большие наклоны прямой (малые значения U_0) не дают решений с дискретным энергетическим спектром.

Постоянные B_1 и B_2 в волновых функциях y_1 и y_2 могут быть определены из условия нормировки.

б) Инфинитное движение ($E > U_0$)

В этом случае система уравнений (1) принимает вид

$$y_1'' + k^2 y_1 = 0,$$
$$y_2'' + k_0^2 y_2 = 0,$$

где k^2 – то же, что и ранее, а $k_0^2 = \dfrac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}$. Теперь решения этих уравнений удобнее представить бегущими плоскими волнами де Бройля и записать так:

$$y_1 = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \text{ и } y_2 = A_2 e^{il_0 x} + B_2 e^{-ik_0 x}. \quad (8)$$

Использование граничных условий приводит к системе алгебраических уравнений относительно коэффициентов A_1, B_1, A_2 и B_2:

1) $A_1 + B_1 = 0,$

2) $A_1 e^{ika} + B_1 e^{-ika} = A_2 e^{il_0} + B_2 e^{-ik_0 x},$

3) $ik(A_1 e^{ik} - B_1 e^{-eika}) = ik_0(A_2 e^{ik_0 a} - B_2 e^{-ik_0 a}).$

Отсюда видно, что $A_1 = -B_1$. Поэтому систему (8) можно преобразовать к виду

$$A \sin ka = A_2 e^{ik_0 a} + B_2 e^{-ik_0 a},$$

$$A \cos ka = \frac{ik_0}{k}(A_2 e^{ik_0 a} - B_2 e^{-ik_0 a}).$$

Таким образом, получена система двух уравнений с тремя неизвестными. При этом никакие ограничения на значения k и k_0 не налагаются. Для решения системы удобно одну из неизвестных амплитуд считать известной; очевидно, имеет смысл принять равной единице амплитуду падающей волны. В рассматриваемой геометрии задачи (см. рис.3.1) такой амплитудой является B_2, т.к. волна может падать на бесконечно высокую потенциальную стенку, лишь распространяясь справа налево в направлении отрицательных значений x. Кроме того, введем показатель преломления $n = \dfrac{k}{k_0}$. Таким образом, принимая $B_2 = 1$, получаем систему

$$\begin{aligned} A \sin ka &= A_2 e^{ik_0 a} + e^{-ik_0 a}, \\ -inA \cos ka &= A_2 e^{ik_0 a} - e^{-ik_0 a}. \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь A_2 имеет смысл амплитудного коэффициента отражения падающей волны от границы $x = a$.

Решая систему уравнений (9), получаем:

$$A_2 = e^{-i2k_0 a}\frac{1 - in}{1 + in \cdot tg(ka)},$$

$$A = e^{-i2k_0 a}\frac{1}{\sin(ka) + in \cdot \cos(ka)}.$$

При этом вероятность отражения (коэффициент отражения) частицы на границе $x = a$ при ее движении справа налево

$$R = |A_2|^2 = \frac{1+n^2}{1+n^2 tg^2(ka)}.$$

Все полученные результаты справедливы при любых значениях $E > U_0$.

Задача 2. Частица массы движется в поле потенциального барьера

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x \le 0; \\ U_0, & 0 < x < a; \\ 0, & x \ge a. \end{cases}$$

Определить коэффициенты прохождения и отражения в случаях, когда энергия частицы *E:* а) меньше высоты барьера; б) больше высоты барьера.

<u>Решение</u>

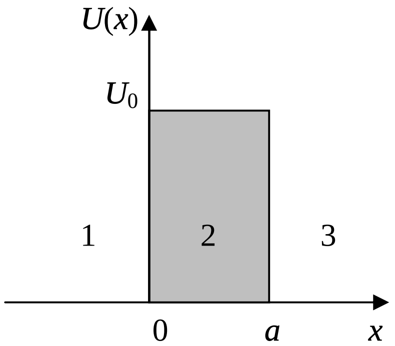


Рис.3.3

При заданном распределении потенциала можно выделить три области – 1, 2 и 3, как показано на рис.3.3. Соответственно, для каждой из областей можно записать стационарное уравнение Шредингера:

$$\begin{aligned} & y_1'' + \frac{2mE}{\hbar^2} y_1 = 0, \\ & y_2'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0) y_2 = 0, \\ & y_3'' + \frac{2mE}{\hbar^2} y_3 = 0. \end{aligned} \qquad (1)$$

Граничные условия имеют вид:

$$y_1(0) = y_2(0), \quad y_1'(0) = y_2'(0), \quad y_2(a) = y_3(a), \quad y_2'(a) = y_3'(a). \qquad (2)$$

Т.к. движение финитное, то, независимо от величины энергии частицы, ее энергетический спектр непрерывен. Однако коэффициенты отражения и прохождения будут различными в зависимости от величины энергии. Дальнейшее решение задачи будем выполнять отдельно для случаев $E < U_0$ и $E > U_0$.

а) Движение с энергией $E < U_0$.

В этом случае уравнения (1) можно переписать в виде:

$$\begin{aligned} & y_1'' + k^2 y_1 = 0, \\ & y_2'' - g^2 y_2 = 0, \\ & y_3'' + k^2 y_3 = 0, \end{aligned} \qquad (3)$$

где $k^2 = \dfrac{2mE}{\mathbf{h}^2}$ и $g^2 = \dfrac{2m}{\mathbf{h}^2}(U_0 - E)$. Решения этих уравнений для областей 1 и 3 удобно, как и в задаче 1, представить в форме плоских волн. Тогда

$$y_1 = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}, \quad y_2 = A_2 e^{gx} + B_2 e^{-gx}, \quad y_3 = A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx}.$$

Пусть частица движется в направлении $x > 0$. Как и ранее (в задаче 1), примем амплитуду падающей волны $A_1 = 1$. Однако теперь нарастающим решением в области 2 пренебрегать нельзя, т.к. ширина барьера конечная. Кроме того, учитывая, что в области 3 отраженной волны нет, будем считать $B_3 = 0$. Таким образом, решения имеют вид:

$$y_1 = e^{lkx} + B_1 e^{-lkx}, \quad y_2 = A_2 e^{gx} + B_2 e^{-gx}, \quad y_3 = A_3 e^{lkx},$$

а задача определения коэффмцментов отражения от барьера и прохождения сквозь барьер сводится к нахождению амплитуд B_1 и A_3. Используя граничные условия, получаем систему алгебраических уравнений относительно неизвестных коэффициентов:

$$\begin{aligned}
&1)\quad 1 + B_1 = A_2 + B_2,\\
&2)\quad ik(1 - B_1) = g(A_2 - B_2),\\
&3)\quad A_2 e^{ga} + B_2 e^{-ga} = A_3 e^{ika},\\
&4)\quad g(A_2 e^{ga} - B_2 e^{-ga}) = ikA_3 e^{ika}.
\end{aligned} \tag{3}$$

Складывая и вычитая уравнения 3) и 4), выражаем коэффициенты A_2 и B_2 через A_3:

$$\begin{aligned}
A_2 &= \frac{A_3}{2}\left(1 + \frac{ik}{g}\right) e^{ika} e^{-ga},\\
B_2 &= \frac{A_3}{2}\left(1 - \frac{ik}{g}\right) e^{ika} e^{ga}.
\end{aligned}$$

Подставив эти выражения для A_2 и B_2 в уравнения 1) и 2), получаем систему двух уравнений относительно искомых значений B_1 и A_3:

$$\begin{aligned}
&1)\ 1 + B_1 = \frac{A_3}{2g} e^{ika}\left((g + ik)e^{-ga} + (g - ik)e^{ga}\right),\\
&2)\ 1 - B_1 = \frac{A_3}{2ik} e^{ika}\left((g + ik)e^{-ga} - (g - ik)e^{ga}\right).
\end{aligned} \tag{4}$$

Введем «показатель преломления» $n = \dfrac{k}{g}$ и учтем, что в уравнениях (4) слагаемыми с множителями e^{ga} мого больше слагаемых с коэффициентом e^{-ga}, т.е. последними можно пренебречь. Тогда амплитуда прошедшей волны

$$A_3 = -\frac{4in}{(1 - un)^2} e^{-ika} e^{-ga}.$$

При этом коэффициент прохождения барьера

$$D = |A_3|^2 = \frac{16n^2}{(1+n^2)^2} e^{-2\gamma a} = \frac{16n^2}{(1+n^2)^2} e^{-2\frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}a}.$$

Обычно величина $\dfrac{16n^2}{(1+n^2)^2} \sim 1$. Поэтому окончательно получаем:

$$D \approx e^{-\frac{2\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}a} \text{ и } R = 1 - D. \qquad (5)$$

б) Движение с энергией $E > U_0$.

Т.к. $E > U_0$, то уравнения (1) можно записать в виде:

$$y_1'' + k^2 y_1 = 0,$$

$$y_2'' + k_2^2 y_2 = 0,$$

$$y_3'' + k^2 y_3 = 0,$$

где величина k^2 такая же, что и в первой части задачи, а $k_2^2 = \dfrac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}$. Тогда решениями этих уравнений являются плоские волны, причем, по-прежнему, в области 3 существует только прошедшая волна и, кроме того, считаем амплитуду падаюшей волны равной единице:

$$y_1 = e^{lkx} + B_1 e^{-lkx}, \qquad y_2 = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}, \qquad y_3 = A_3 e^{lkx}.$$

Используя граничные условия и принимая $\dfrac{k}{k_2} = \sqrt{\dfrac{E}{E-U_0}} = n > 1$, получаем систему уравнений:

$$\begin{aligned}
&1) \quad 1 + B_1 = A_2 + B_2,\\
&2) \quad n(1 - B_1) = (A_2 - B_2),\\
&3) \quad A_2 e^{ik_2 a} + B_2 e^{-ik_2 a} = A_3 e^{ika},\\
&4) \quad A_2 e^{\gamma a} - B_2 e^{-\gamma a} = nA_3 e^{ika}.
\end{aligned} \qquad (6)$$

В рассматриваемом случае интерес представляет коэффициент отражения $R = |B_1|^2$, т.е решение системы (6) относительно амплитуды B_1. Таким же способом, что и ранее, исключаем из системы уравнений (6) A_2 и B_2:

$$1)\ 1 + B_1 = \frac{1}{2} A_3 e^{ika}\left((1+n)e^{-ik_2 a} + (1-n)e^{ik_2 a}\right),$$

$$2)\ 1 - B_1 = \frac{1}{2n} A_3 e^{ika}\left((1+n)e^{-uk_2 a} - (1-n)e^{ik_2 a}\right).$$

Разделив уравнение 1) на уравнение 2), находим амплитуду отраженной волны и, соответственно, коэффициент отражения:

$$B_1 = \frac{(1-n^2)(e^{2ik_2 a} - 1)}{(n+1)^2 - (n-1)e^{2ik_2 a}} \text{ и } R = |B_1|^2 = \frac{2(n^2-1)^2(1 - \cos 2k_2 a)}{(n+1)^4 + (n-1)^4 - 2(n^2-1)^2 \cos 2k_2 a}.$$

Таким образом, в отличие от классической механики, даже если энергия частицы превышает высоту потенциального барьера, коэффициент отражения от барьера отличен от нуля.

***Задача* 3.** Частица массы m движется в поле поьенциального барьера

$$U(x)=\begin{cases}0, & x<0;\\ U_0(1-x/a), & 0\le x\le a;\\ 0, & x>a\end{cases}$$

с энергией $E<U_0$. Определить коэффициент прозрачности D баоьера.

Решение

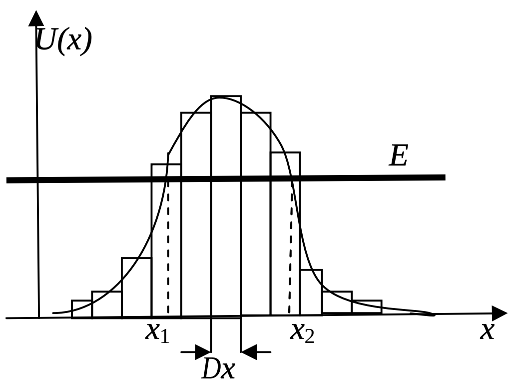


Рис.3.4

При вычислении коэффициента прозрачности потенциального барьера произвольной формы последний можно представить как последовательность прямоугольных барьеров одинаковой ширины Δx (рис.3.4). Тогда для элементарных барьеров, для которых $E<U_i$ $(x_1\le x\le x_2)$, коэффициент прозрачности

$$D=\prod_i D_i\,,$$

причем D_i определяются формулой (5) задачи 2. Поэтому

$$D=\prod_i e^{-\frac{2\sqrt{2m(U_i-E)}}{\hbar}\Delta x}=e^{-\sum_i\frac{2\sqrt{2m(U_i-E)}}{\hbar}\Delta x}.$$

При $\Delta x\to 0$ получаем

$$D=e^{-\frac{2}{\hbar}\int\limits_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m(U(x)-E)}dx}, \qquad (1)$$

где x_1 и x_2 – корни уравнения $U(x)=E$.

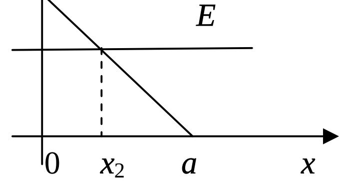


Рис.3.5

Воспользуемся этой формулой для нахождения коэффициента прозрачности треугольного потенциального барьера, заданного в условии задачи и представленного на рис.3.5. Очевидно, что $x_1=0$ и $x_2=\dfrac{U_0-E}{U_0}a$. Вычислим мнтеграл в показатели экспоненты выражения (1):

$$\sqrt{2m}\int\limits_0^{(U_0-E)a/U_0}\sqrt{U_0(1-x/a)-E}dx=\sqrt{2m}\,\frac{2}{3}\frac{(U_0-E)^{3/2}}{U_0}a\,.$$

Тогда

$$D = e^{-\frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar}\frac{(U_0-E)^{3/2}}{U_0}a}.$$

Задача **4.** Определить среднее значение потенциальной энергии квантового гармонического осциллятора массы *m*, частота собственных колебаний которого ω, находящегося в состоянии с энергией $\frac{3}{2}\hbar\omega$.

<u>Решение</u>

Т.к. энергия квантового гармонического осциллятора $E_n = \hbar\omega(n+1/2)$, то из условия задачи следует, что $n=1$. Для этого состояния, в соответствии с (3.2),

$$\psi_1 = C_1 x e^{-x^2/2} = Cxe^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}.$$

Находим постоянную C из условия нормировки:

$$C^2\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2}dx = 1.$$

Воспользовавшись значением интеграла Пуассона и его производной (см. Приложение Е), получаем

$$C^2 = 2\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{3/2}. \qquad (1)$$

Оператор потенциальной энергии совпадает с потенциальной энернией, которая для квантового гармонического осциллятора равна $\frac{m\omega^2 x^2}{2}$. Поэтому

$$\bar{U} = C^2\frac{m\omega^2}{2}\int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2}dx. \qquad (2)$$

Интеграл в (2) можно выразить через интеграл Пуассона, как это показано в Приложении Е $\left(\int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-\alpha x^2}dx = \frac{3}{4}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^5}}\right)$. Поэтому

$$\bar{U} = C^2\frac{m\omega^2}{2}\frac{3}{4}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{5/2}\sqrt{\pi}.$$

Подставляя значение C^2 из (1), окончательно получаем $\langle U\rangle = \frac{3}{4}\hbar\omega$. Заметим, что средняя потенциальная энергия квантового гармонического осциллятора равна половине его полной энергии. При этом очевидно, что и средняя кинетическая энергия также равна полученному значению. Таким образом, как и в классической механике, средняя потенциальная энергия квантового гармонического осциллятора равна его средней кинетической энергии.

3.3. Задания для самостоятельной работы

3.1. Найти энергетический спектр частицы массы m, находящейся в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной a с бесконечно высокими стенками.

Ответ: $E_n = \dfrac{n^2 p^2 \mathbf{h}^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, ...$

3.2. Для частицы в одномерной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками шириной a найти вероятность локализации в области $\frac{1}{4} \le x \le \frac{3}{4}$, если она обладает наименьшей возможной энергией.

Ответ: $W(\frac{1}{4} \le x \le \frac{3}{4}) = \frac{1}{2} + \frac{1}{p} \approx 0{,}82$.

3.3. Для частицы массой m, находящейся на n-ом энергетическом уровне в прямоугольной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками шириной a вычислить средние координату, импульс, а также среднеквадратичные отклонения этих величин.

Ответ: $\langle x \rangle = \dfrac{a}{2}, \quad \langle p_x \rangle = 0, \quad \sqrt{\langle \Delta x^2 \rangle} = \dfrac{a}{2\sqrt{3}}, \quad \sqrt{\langle \Delta p_x^2 \rangle} = \dfrac{np\mathbf{h}}{a}.$

3.4. Для частицы массы m в одномерной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками шириной a найти число энергетических уровней с энергиями, заключенными в интервале значений от E до $E + dE$.

Ответ: $dN = \dfrac{a}{p\mathbf{h}} \sqrt{\dfrac{m}{2E}} dE$.

3.5. Получить уравнение, определяющее спектр собственных значений энергии частицы массой m, движущейся в потенциальной яме вида

$$U(x) = \begin{cases} U_0, & x < 0; \\ 0, & 0<x<a; \\ U_0, & x > a; \end{cases}.$$

в области энергий $E < U_0$.

Ответ: $ka = np - 2\arcsin \dfrac{\mathbf{h}k}{\sqrt{2mU_0}}$,

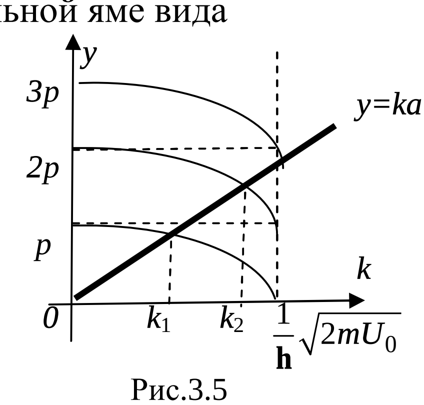


Рис.3.5

где $n = 1, 2...,\quad k \le \frac{1}{\mathbf{h}}\sqrt{2mU_0}$, *причем значения* arcsin *берутся в первой четверти (см. рис.3.5).* $E_n = \frac{\mathbf{h}^2 k_n^2}{2m}$.

3.6. Получить уравнение, определяющее спектр собственных значений энергии частицы массой *m*, движущейся в потенциальной яме вида

$$U(x) = \begin{cases} U_1, & x < 0; \\ 0, & 0<x<\text{a}; \\ U_2, & x > a; \end{cases}$$

причем $U_1 < U_2$, в области энергий $E < U_1$.

Ответ:

$$ka = np - \arcsin\frac{\mathbf{h}k}{\sqrt{2mU_1}} - \arcsin\frac{\mathbf{h}k}{\sqrt{2mU_2}},\quad n=1, 2, ...\quad \mathbf{h}k \le \sqrt{2mU_1},$$

причем значения arcsim *берутся в первой четверти (см. зад. 3.5).*

3.7. Для линейного гармонического осциллятора, энергия которого равна $\frac{5}{2}\mathbf{h}w$, вычислить среднюю кинетическую энергию.

Ответ: $\langle E_k \rangle = \frac{5}{4}\mathbf{h}w$.

3.8. Найти энергетические уровни частицы массой *m*, находящейся в потенциальном поле вида $U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0; \\ kx^2/2, & x > 0. \end{cases}$

(Указание: учесть, что в выражениях (3.2) и (3.3) при $x = 0$ полиномы $H_n(x) = 0$)

Ответ: $E_l = \mathbf{h}w(2l + \frac{3}{2}),\quad l = 1, 2, ...$ *только для нечетных n.*

3.9. С помощью уравнения Шредингера найти энергию гармонического осциллятора с частотой ω в стационарном состоянии: а) $y(x) = Ae^{-a^2x^2}$; б) $y(x) = Bxe^{-a^2x^2}$, где *A*, *B* и *a* – постоянные величины.

Ответ: а) $E = \frac{\mathbf{h}w}{2}$; *б)* $E = \frac{3}{2}\mathbf{h}w$; $(a^2 = \frac{mw}{2\mathbf{h}})$

3.10. Какова вероятность обнаружения частицы массой *m*, движущейся в потенциальном поле $U(x) \sim x^2$, вне классических границ?

Ответ: $W = 1 - \frac{1}{\sqrt{p}} \int_{-1}^{1} e^{-x^2} dx$.

3.11. Определить коэффициент отражения частицы массой m от потенциального барьера $U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ U_0, & x > 0; \end{cases}$ при условии $E < U_0$. Пояснить полученный результат.

Ответ: $R = 1$

3.12. Для условия задачи **3.6** вычислить коэффициенты отражения и прохождения при условии $E > U_0$.

Ответ: $R = \frac{(\sqrt{E} - \sqrt{(E - U_0)})^2}{(\sqrt{E} + \sqrt{(E - U_0)})^2}$, $D = \frac{4\sqrt{E(E - U_0)}}{(\sqrt{E} + \sqrt{(E - U_0)})^2}$

3.13. Для частицы в глубокой прямоугольной потенциальной яме (см. рис.3.6), у которой $a^2 U_0 >> \frac{\mathbf{h}^2}{m}$, найти приближенное аналитическое выражение энергии для нижних уровней ($E << U_0$).

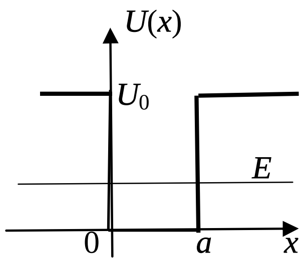


Рис.3.6

Ответ: $E_n \approx \frac{p^2 \mathbf{h}^2 n^2}{2ma^2} \left(1 - 2\sqrt{\frac{2\mathbf{h}^2}{ma^2 U_0}} \right)$.

3.14. Частица массой m движется в потенциальном поле $U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \quad x > a; \\ -U_0, & 0 < x < a. \end{cases}$

Найти коэффициенты отражения и прохождения при условии $E > 0$.

Ответ: $R = \left(1 + \frac{4E(E + U_0)}{U_0^2 \sin^2 k_0 a} \right)^{-1}$, $D = \left(1 + \frac{U_0^2 \sin^2 k_0 a}{4E(E + U_0)} \right)^{-1}$, $k_0^2 = \frac{2mE}{\mathbf{h}^2}$.

3.15. При движении электрона в потенциальном поле, $U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \quad x > a; \\ U_0, & 0 < x < a; \end{cases}$ найти первые два значения энергии, при которых электрон будет беспрепятственно проходить через барьер, если $U_0 = 10$ эВ и $a = 5 \mathring{A}$. (Указание: беспрепятственному движению соответствует значение $D = 1$)

Ответ: $E_n = \frac{p^2 \mathbf{h}^2 n^2}{2ma^2}$, $n = 1, 2, \ldots$ $E_1 = 11{,}5$ эВ; $E_2 = 16$ эВ.

3.16. Вычислить коэффициент прозрачности барьера, изображенного на рисунке 3.7, для частицы массой m с энергией $E < U_0$.

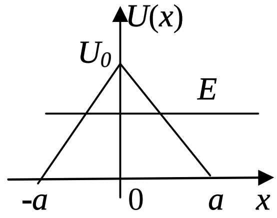


Рис.3.7

$$Ответ:\ D \approx \exp\left(-\frac{8\sqrt{2}ma}{3\hbar U_0}(U_0 - E)^{3/2} \right).$$

3.17. Частица массой m движется в поле потенциального барьера (см. рис.3.8):

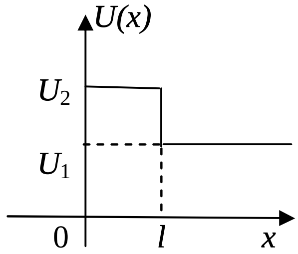


Рис.3.8

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ U_2, & 0 < x < l; \\ U_1, & x > l. \end{cases}$$

Найти коэффициент прозрачности барьера, если энергия частицы $U_1 < E < U_2$. Частица движется слева направо.

$$Ответ:\ D = \frac{16(n_2^2 - 1)(n_1^2 - 1)U_1}{n_2^2(U_2 - U_1)} e^{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(U_2 - E)}},\ где\ n_2 = \sqrt{\frac{U_2}{E}}\ \ и\ \ n_1 = \sqrt{\frac{E}{U_1}}.$$

3.18. Для частицы массой m найти коэффициент прозрачности барьера

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < -a, \quad x > a; \\ U_0\left(1 - \frac{x^2}{a^2}\right), & -a \le x \le a; \end{cases}$$

если $E < U_0$.

$$Ответ:\ D = \exp\left[-\frac{\pi a}{2\hbar}\sqrt{\frac{2m}{U_0}}(U_0 - E) \right].$$

4. ДВИЖЕНИЕ В ЦЕНТРАЛЬНОМ ПОЛЕ

4.1. Краткие теоретические сведения

4.1.1. Задача двух тел в квантовой механике

Как известно из классической механики, полная энергия замкнутой системы двух взаимодействующих тел массами m_1 и m_2 может быть представлена в виде:

$$T_c + T + U(r) = const\,, \qquad (4.1)$$

где $T_c = \dfrac{MV_c^2}{2}$ – кинетическая энергия движения центра масс ($M = m_1 + m_2$, $\vec{V}_c = \dot{\vec{R}}_c = const$ – скорость центра масс);

$$T = \frac{\mu v^2}{2} = \frac{\mu \dot{r}^2}{2} + \frac{L^2}{2\mu r^2} \quad – \qquad (4.2)$$

кинетическая энергия относительного движения (v – относительная скорость и $\mu = \dfrac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ – приведенная масса), $\vec{L} = [\vec{r}\mu\vec{v}] = const$ – момент импульса ($\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1$).

Заменяя динамические переменные в (4.1) и (4.2) соответствующими операторами, в квантово-механической задаче двух тел получаем выражение для гамильтониана системы

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_c - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + U(r)\,. \qquad (4.3)$$

Здесь Δ_c – оператор Лапласа по координатам центра масс, а Δ – оператор Лапласа по координатам μ-частицы. При этом стационарное уравнение Шредингера

$$\hat{H}_0\psi(\vec{R}_c, \vec{r}) = (E_c + E)\psi(\vec{R}_c, \vec{r}),$$

где E_c и E – энергия движения центра масс и энергия относительного движения соответственно, допускает разделения переменных:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_c\psi(\vec{R}_c) = E_c\psi(\vec{R}_c),$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\psi(\vec{r}) + U(r)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})\,. \qquad (4.4)$$

Первое из этих уравнений описывает свободное движение центра масс, а второе – относительное движение μ-частицы. Свободное движение центра масс является тривиальным и в дальнейшем рассматриваться не будет. Таким образом, задача двух тел в квантовой механике сводится к решению стационарного уравнения Шредингера (4.4) для m-частицы, движущейся в центрально-симметричном поле $U(r)$ с центром в центре масс системы.

В сферических координатах уравнение (4.4) приобретает вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r\psi-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\Delta_{\vartheta,\varphi}\psi+U(r)\psi=E\psi\ , \tag{4.5}$$

где Δ_r – радиальная часть оператора Лапласа, а $\Delta_{\vartheta,\varphi}$ – угловая (см. Приложение В). При этом решение представляется произведением

$$\psi(r,\vartheta,\varphi)=R(r)\psi(\vartheta,\varphi), \tag{4.6}$$

и уравнение (4.5) допускает разделение переменных. Подстановка решения (4.6) в уравнение (4.5) дает

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{2m}{\hbar^2}r^2(E-U)=-\frac{1}{\psi(\vartheta,\varphi)}\Delta_{\vartheta,\varphi}\psi(\vartheta,\varphi)=const\,.$$

Т.к. $-\hbar^2\Delta_{\vartheta,\varphi}$ – оператор квадрата момента импульса, то постоянная разделения в этом уравнении с точностью до постоянной Планка представляет собой квадрат момента импульса. Решением уравнения

$$-\Delta_{\vartheta,\varphi}\psi(\vartheta,\varphi)=\frac{L^2}{\hbar^2}\psi(\vartheta,\varphi)$$

являются сферические функции (см. 2.1.2 и Приложение Г)

$$Y_{lm}=P_l^{|m|}(\cos\vartheta)e^{im\varphi}\ , \tag{4.7}$$

принадлежащие собственным значениям $L^2=\hbar^2 l(l+1)$ и $L_z=m\hbar$ $\quad(l=0,1,2,\ldots;\quad m=0,\pm1,\pm2,\ldots,\pm l)$ (см. Приложение Г). Таким образом, независимо от конкретного вида центрального поля $U(r)$ угловая часть волновой функции имеет вид сферических функций (4.7), и в этом поле определены значения модуля и проекции момента импульса.

Радиальная часть волновой функции является решением уравнения

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-U-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right)R=0\,. \tag{4.8}$$

Введение вспомогательной функции такой, что $R=\dfrac{V}{r}$, позволяет свести задачу о радиальном движении в центральном поле к решению одномерного уравнения Шредингера в поле эффективного потенциала $U_{ef}=U(r)+\dfrac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$ (сравните с классическим выражением (4.2))

$$\frac{d^2V}{dr^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-U(r)-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right)V=0 \tag{4.9}$$

с граничным условием $V(0)=0$, вытекающим из условия ограниченности функции $R(r)$ при $r \to 0$.

4.1.2. Водородоподобный атом

Важнейшим центральным полем является кулоновское поле $U(r)=\frac{a}{r}$. Так, энергия электрона в водородоподобном атоме $U(r)=-\frac{1}{4pe_0}\frac{Ze^2}{r}$, и одномерное уравнение (4.9) имеет вид:

$$\frac{d^2V}{dr^2}+\frac{2m_e}{\mathbf{h}^2}\left(E+\frac{1}{4pe_0}\frac{Ze^2}{r}\right)V-\frac{l(l+1)}{r^2}V=0. \qquad (4.10)$$

Введением безразмерных переменных

$$r=\frac{\kappa}{a}, \qquad e=\frac{E}{U_0}, \text{ а также } 2e=-a^2, \qquad (4.11)$$

где $a=\frac{4pe_0\mathbf{h}^2}{m_e e^2}$ – радиус первой боровской орбиты и $U_0=\frac{1}{4pe_0}\frac{e^2}{a}$,

приводит уравнение (4.10) к виду

$$V'+\left(-a^2+\frac{2Z}{r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)V=0. \qquad (4.12)$$

Решением этого уравнения является

$$V=r^{l+1}e^{-ar}\sum_{k=0}^{n-l-1}c_k r^k,$$

где квантовое число n, называемое главным квантовым числом, принимает значения $n=1,2,\ldots$, орбитальное квантовое число $l=0,1,2,\ldots,(n-1)$, а коэффициенты c_k связаны рекуррентным соотношением

$$c_{k+1}=\frac{2\left[a(l+k+1)-Z\right]}{(k+l+1)(l+k+2)-l(l+1)}c_k. \qquad (4.13)$$

При этом $a=\frac{Z}{n}$. Поэтому

$$R(r)=R_{nl}=r^l e^{-(Z/n)r}\sum_{k=0}^{n-l-1}c_k r^k. \qquad (4.14)$$

Таким образом, заданием тройки квантовых чисел $n=1,2,\ldots$, $l=0,1,2,\ldots,(n-1)$, $m=0,\pm1,\pm2,\ldots,\pm l$ однозначно определяется состояние электрона в водородоподобном атоме:

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

$$E_m=eU_0=-\frac{\alpha^2}{2}U_0=-\frac{Z^2e^4m_e}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2n^2},\quad L^2=\hbar^2 l(l+1),\qquad L_z=m\hbar. \quad (4.15)$$

Вероятность локализации электрона

$$dW=|\psi_{nlm}|^2\,dV=R_{nl}^2r^2dr\cdot|Y_{lm}|^2\sin\theta\,d\theta\,d\varphi\;, \quad (4.16)$$

представляет собой произведение двух независимых распределений электронной плотности – радиального и углового:

$$dW(r)=R_{nl}^2r^2dr \text{ и } dW(\theta,\varphi)=|Y_{lm}|^2\sin\theta\,d\theta\,d\varphi\;. \quad (4.17)$$

Разумеется, в вероятностях (4.16) подразумеваются функции R_{nl} и Y_{lm}, нормированные на единицу.

В Приложении Ж представлены несколько первых функций R_{nl} и Y_{lm} и соответствующие им радиальное и угловое распределения электронной плотности. При этом следует помнить, что функции R_{nl} и Y_{lm} определены лишь с точностью до постоянного множителя.

В атомной физике принято описывать состояние электрона в атоме главным квантовым числом и буквенным обозначением орбитального квантового числа:

L = 0, 1, 2, 3, 4, 5
s, *p*, *d*, *f*, *g*, *h*

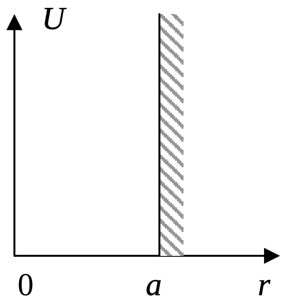
(так, например, состояние 1*s* – это состояние с n = 1 и l = 0, а состоянию 3*d* соответствуют n = 3 и l = 2).

Для кулоновского поля характерно вырождение, кратность которого

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

4.2. Примеры решения задач

Задача 1. Определить волновые функции и энергетический спектр частицы массой m_0 с нулевым орбитальным моментом, находящейся в сферически симметричной потенциальной яме радиуса a с бесконечно высокими стенками. Найти наиболее вероятное расстояние от центра поля.



Решение

Одномерное уравнение Шредингера с учетом того, что l = 0, имеет вид:

$$V'+\frac{2m_0}{\hbar^2}EV=0.$$

Обозначая $\dfrac{2m_0E}{\hbar^2}=k^2$, получаем решение, удовлетворяющее условию $V(0)=0$:

$$V=A\sin kr.$$

Соответственно, радиальная волновая функция имеет вид:

$$R(r)=A\frac{\sin(kr)}{r}.$$

При $r=a$ $R=0$, поэтому $ka=n\pi$, где $n=0,1,2,\ldots$, т.е. $R(r)=\dfrac{A}{r}\sin\dfrac{n\pi}{a}r$.

Т.к. $l=0$, то $m=0$, и угловая часть волновой функции определяется сферической функцией $Y_{00}=const$. Таким образом, волновая функция частицы имеет вид:

$$\psi(r,\theta,\varphi)=R_{n0}Y_{00}=\frac{A}{r}\sin\left(\frac{n\pi}{a}r\right),$$

где постоянная A находится из условия нормировки

$$A^2\int_0^a R_{n0}^2r^2dr\int_0^{\pi}\sin\theta\,d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi=1.$$

Подставляя функцию R_{n0}, получаем $A=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi a}}$. Окончательно

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{\pi a}}\frac{\sin\left(\frac{n\pi}{a}r\right)}{r},\qquad n=1,2,\ldots.$$

Энергетический спектр частицы дискретный и определяется выражением

$$E_n=\frac{k^2\hbar^2}{2m_0}=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m_0a^2}.$$

Для определения наиболее вероятного расстояния от центра поля запишем выражение для вероятности нахождения частицы на расстоянии от r до $r+dr$:

$$dW(r)=|R_n(r)|^2r^2dr$$

и исследуем функцию распределения

$$f(r)=|R_n(r)|^2r^2=A^2\frac{\sin^2\left(\frac{n\pi}{a}r\right)}{r^2}r^2=A^2\sin^2\left(\frac{n\pi}{a}r\right)=\frac{A^2}{2}\left(1-\cos\frac{2n\pi}{a}r\right),$$

которая максимальна при $\cos\dfrac{2n\pi}{a}r=-1$. Отсюда получаем $r_{нв}=\dfrac{(2m+1)a}{2n}$, где $m=0,1,2,\ldots,(n-1)$. Так, в основном состоянии (n = 1) наиболее вероятное расстояние от центра поля составляет величину $\dfrac{a}{2}$, а при n = 2 имеется два равновероятных расстояния $\frac{a}{4}$ и $\frac{3a}{4}$, соответствующие максимуму функции распределения.

Задача 2. Найти энергетический спектр квантового ротатора (частицы массой m_0, свободно движущейся по поверхности сферы постоянного радиуса r_0.

<u>Решение</u>

Т.к. движение частицы по поверхности сферы является свободным, то ее потенциальная энергия $U(r_0) = const$, и ее можно принять равной нулю. Кроме того, $r = r_0 = const$, и поэтому стационарное уравнение Шредингера (4.5) имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0 r_0^2}\Delta_{\theta,\varphi}\psi = E\psi \ .$$

Но $\psi = \psi(\theta, \varphi) = Y_{lm}$, а $-\hbar^2\Delta_{\theta,\varphi} Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1)Y_{lm}$. Поэтому

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0 r_0^2}, \text{ где } l = 0, 1, 2, \ldots$$

Задача 3. Электрон в атоме водорода находится в стационарном состоянии, описываемом сферически-симметричной волновой функцией $\psi(r) = A(1+\gamma r)e^{\beta r}$, где A, γ, β – некоторые постоянные. Найти значения этих постоянных и энергию электрона. Определить, в каком состоянии находится электрон.

<u>Решение</u>

Т.к. волновая функция зависит только от r, то уравнение Шредингера для электрона в атоме водорода имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\psi}{dr}\right) - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}\psi = E\psi \ .$$

Подставляя заданную в условии функцию $\psi(r)$ в это уравнение, получаем равенство

$$\gamma\beta^2 r + \beta(4\gamma+\beta) + \frac{2(\gamma+\beta)}{r} + \frac{2m_0e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}\left(\frac{1}{r}+\gamma\right) = -\frac{\hbar^2}{2m_0}E(1+\gamma r),$$

в котором $\frac{m_0 e^2}{4pe_0\mathbf{h}^2}=\frac{1}{a}$, где a = 0,529$\mathring{A}$ – радиус первой боровской орбиты. Постоянные β и γ можно найти, приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях *r*. При этом получаем три уравнения:

1) r^{-1}, $g+b=\frac{1}{a}$;

2) r^0; $b(4g+b)+\frac{2}{a}g=-\frac{2m_0}{\mathbf{h}^2}E$;

3) r^1; $gb^2=-\frac{2m_0}{\mathbf{h}^2}Eg$.

Из уравнения 3) $b^2=-\frac{2m_0}{\mathbf{h}^2}E$, а из уравнения 2) с учетом значения β^2 следует, что $b=-\frac{1}{2a}$. Наконец, из уравнения 1) находим $g=\frac{3}{2a}$. Таким образом, волновая функция заданного в условии задачи стационарного состояния имеет вид:

$$y=A\left(1+\frac{3r}{2a}\right)e^{-r/2a}.$$

Энергия рассматриваемого состояния

$$E=-b^2\frac{\mathbf{h}^2}{2m_0}=-\frac{1}{4a^2}\frac{\mathbf{h}^2}{2m_0}=-\frac{1}{4}\frac{e^4 m_0}{32p^2e_0^2\mathbf{h}^2}.$$

Но $E_n=\frac{1}{n^2}E_1=-\frac{1}{n^2}\frac{e^4 m_0}{32p^2e_0^2\mathbf{h}^2}$. Следовательно, главное квантовое число данного состояния n = 2, а орбитальное квантовое число l = 0. Действительно, в рассматриваемом состоянии $U_{ef}=U(r)=-\frac{1}{4pe_0}\frac{e^2}{r}$, т.е. $l=0$. Окончательно устанавливаем, что электрон находится в состоянии 2*s*.

Постоянную *A* найдем из условия нормировки:

$$\int_0^\infty |y(r)|^2 r^2dr=A^2\int_0^\infty (1+3r/2a)^2 e^{-r/a}r^2dr=1.$$

Выполнив интегрирование, получаем $A=\frac{1}{\sqrt{74a^3}}$. Таким образом,

$$y=\frac{1}{\sqrt{74a^3}}\left(1+\frac{3r}{2a}\right)e^{-r/2a}.$$

Задача 4. Определить потенциал электростатического поля, создаваемый электронным облаком атома водорода, находящегося в основном состоянии, в центре ядра.

<u>Решение</u>

В силу сферической симметрии электронного облака в основном состоянии атома водорода уравнение Пуассона для потенциала имеет вид:

$$\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rj)=-\frac{r}{e_0},$$

где ρ – электронная плотность. С другой стороны $r=-e\dfrac{dW}{dV}$,

а

$$dW=A^2R_{10}^2\left|Y_{00}\right|^2du=A^2R_{10}^2\left|Y_{00}\right|^2r^2dr\sin J\,dJ\,dj\ .$$

В 1s-состоянии $R_{10}=e^{-r/a}$ и $Y_{00}=1$ (см. Приложение Ж). Из условия нормировки

$$A^2\int_0^{\infty}r^2e^{-2r/a}dr\int_0^{p}\sin J\,dJ\int_0^{2p}dj=1$$

находим, что $A^2=\dfrac{1}{p\,a^3}$. Тогда уравнение Пуассона принимает вид:

$$\frac{d^2}{dr^2}(rj)=\frac{e}{pe_0a^3}r\cdot exp(-2r/a).$$

Проинтегрировав дважды это уравнение, получаем

$$rj=\frac{e}{4pe_0a}r\cdot\exp(-2r/a)+\frac{e}{4pe_0}\exp(-2r/a)+C_1r+C_2,$$

где C_1 и C_2 – постоянные интегрирования. Принимая $j(\infty)=0$, выражение для потенциала приводим к виду:

$$j=\frac{e}{4pe_0a}\exp(-2r/a)+\frac{1}{r}\left(\frac{e}{4pe_0}\exp(-2r/a)+C_2\right).$$

Из условия ограниченности потенциала при $r\to0$ получаем $C_2=-\dfrac{e}{4pe_0}$. Тогда

$$j=\frac{e}{4pe_0a}\exp(-2r/a)+\frac{e}{4pe_0r}(\exp(-2r/a)-1).$$

Исследуем второе слагаемое при $r\to0$ с использованием правила Лопиталя (если $f(x)=\dfrac{g(x)}{h(x)}$ и если $\dfrac{g(x_0)}{h(x_0)}=\dfrac{0}{0}$, то $\lim\limits_{x\to x_0}f(x)=\lim\limits_{x\to x_0}\dfrac{g'}{h'}$). Очевидно, что

$$\lim_{r\to0}\frac{\exp(-2r/a)-1}{r}=\lim_{r\to0}\frac{-\frac{2}{a}\exp(-2r/a)}{1}=-\frac{2}{a}.$$

Тогда потенциал электростатического поля, создаваемого электронным облаком в центре ядра, будет равным:

$$j\,(0) = \frac{e}{4pe_0 a} - \frac{2e}{4pe_0 a} = -\frac{e}{4pe_0 a}.$$

4.3. Задания для самостоятельной работы

4.1. Вычислить для основного состояния частицы массой m, находящейся в сферически-симметричной потенциальной яме радиусом r_0 с бесконечными стенками, вероятность нахождения частицы в области $r < r_{вер}$ ($r_{вер}$ – наиболее вероятное расстояние от центра поля).

Ответ: $W(r < r_{вер}) = 1/2$.

4.2. Найти волновые функции, описывающие p-состояние частицы массой m, находящейся в сферически симметричной потенциальной яме радиусом r_0 с бесконечными стенками. Показать, что энергетические уровни в этом состоянии определяются уравнением

$tg(kr_0) = kr_0$, где $k^2 = 2mE/\mathbf{h}^2$.

Ответ: $y\,(r, J, j) = \pm A\dfrac{\sin J}{r^2}(kr\cos kr - \sin kr)e^{\pm ij}$.

4.3. Частица массой m_0 находится в сферически-симметричном потенциальном поле

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r < r_0; \\ U_0, & r > r_0. \end{cases}$$

Показать, что уровни энергии частицы в s-состоянии при $E < U_0$ определяются уравнением $\sin kr_0 \pm \dfrac{\mathbf{h}k}{\sqrt{2m_0U_0}}$, где $k^2 = \dfrac{2m_0E}{\mathbf{h}^2}$.

4.4. Для условия задачи 4.3 вычислить интервал значений U_0, при которых имеется лишь один энергетический уровень. Определить положение этого уровня в зависимости от глубины ямы.

Ответ $\dfrac{9p^2\mathbf{h}^2}{8n_0r_0^2} \ge U_0 \ge \dfrac{p^2\mathbf{h}^2}{8m_0r_0^2}$; $E_1 = \dfrac{25p^2\mathbf{h}^2}{72m_0r_0^2} < U_0$.

4.5. Показать, что энергетический спектр частицы с нулевым орбитальным моментом, находящейся в сферически-симметричной потенциальной яме со стенками конечной высоты U_0, непрерывен при $E > U_0$.

4.6. Для электрона, находящегося в 1*s*-состоянии в атоме водорода, вычислить наиболее вероятное, среднее и среднеквадратичное расстояния от ядра.

Ответ: $r_{вер} = a$, $\bar{r} = \frac{3}{4}a$, $r_{кв} = a\sqrt{3}$, a *– радиус первой боровской орбиты.*

4.7. Для электрона, находящегося в 1*s*-состоянии в атоме водорода, вычислить вероятность его нахождения на расстоянии $r > r_{вер}$ от ядра.

Ответ: $W(r > r_{вер}) = 5e^{-2} \approx 0,673$.

4.8. Вычислить вероятность нахождения 1*s*-электрона атома водорода вне классических границ поля.

Ответ: $W = \frac{4}{a^3}\int\limits_{2a}^{\infty} r^2 e^{-2r/a} dr = 13e^{-4} \approx 0,238$.

4.9. Определить среднюю потенциальную энергию электрона в 1*s*-, 2s-состояниях атома водорода.

Ответ: $= \bar{U}_1 = -\frac{e^2}{4pe_0 a}$; $\bar{U}_2 = -\frac{e^2}{12pe_0 a}$.

4.10. Вычислить среднюю кинетическую энергию 1*s*-электрона в атоме водорода.

Ответ: $\bar{T} = \frac{e^2}{32pe_0 a}$.

4.11. Вычислить наиболее вероятное расстояние 2*p*- и 3*d*-электронов от ядра в атоме водорода.
Ответ: 4*a*; 9*a*.

4.12. Вычислить среднюю энергию взаимодействия 2*p*-электрона с ядром в водородоподобном атоме.

Ответ: $\bar{F} = \frac{Ze^2}{48pe_0 a}$.

4.13. Определить электростатический потенциал, создаваемый ядром и электронным облаком атома водорода в основном состоянии.

Ответ: $j(r) = \dfrac{e}{4pe_0}\left(\dfrac{1}{r} + \dfrac{1}{a}\right)\exp(-2r/a)$.

4.14. В атоме водорода найти кратность вырождения энергетического уровня $E = -\dfrac{e^4 m_0}{128pe_0\mathbf{h}^2}$. Записать волновые функции различных состояний электрона $y_{nlm}(r, J, j)$ с этой энергией.

4.15. Определить собственное значение энергии атома водорода в 1s-состоянии, собственная функция которого $y(r) = Ae^{-ar}$, где A и α – некоторые постоянные.

Ответ: $a = \dfrac{4pe_0\mathbf{h}^2}{m_0 e_2^2}$, $\quad E = \dfrac{\mathbf{h}^2}{2m_0 a^2} = \dfrac{m_0 e^4}{32p^2 e_0^2 \mathbf{h}_2}$.

4.16. Найти собственные нормированные функции и собственных значения оператора кинетической энергии вращательного движения плоского ротатора (системы двух жестко связанных, вращающихся в плоскости относительно центра масс системы), если классическое выражение для кинетической энергии имеет вид $T = \dfrac{L^2}{2J}$, где J – момент инерции системы.

Ответ: $y_m(j) = \dfrac{1}{\sqrt{2p}} e^{imj}$, $\quad T_m = \dfrac{m^2\mathbf{h}^2}{2J}$, $\quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$

5. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ. КВАНТОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ И ЭЛЕМЕНТАРНАЯ ТЕОРИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ

5.1. Краткие теоретические сведения

5.1.1.Элементы теории возмущений

Теория возмущений позволяет вычислять поправки к энергиям и собственным функциям стационарных состояний при наличии независящего от времени малого возмущения $V(\vec{r})$.

Пусть $E_m^{(0)}$ и $y_m^{(0)}$ – известные энергия и собственная функция m-го стационарного состояния невозмущенной системы, описываемой гамильтонианом $\hat{H}^{(0)}$, т.е. имеет место равенство

$$\hat{H}^{(0)} y_m^{(0)} = E_m^{(0)} y_m^{(0)}. \tag{5.1}$$

Тогда для m-го стационарного состояния возмущенной системы:

$$\left(\hat{H}^{(0)} + V\right) y_m = E_m y_m, \tag{5.2}$$

где $V = V(\vec{r})$ – малое возмущение, E_m и y_m – энергия и собственная функция этого состояния.

Возмущенные значения E_m и y_m в теории возмущений представляются следующими выражениями:

$$E_m = E_m^{(0)} + \Delta E_m^{(1)} + \Delta E_m^{(2)} + \ldots, \tag{5.3а}$$

$$y_m = y_m^{(0)} + \Delta y_m^{(1)} + \ldots, \tag{5.3б}$$

где $\Delta E_m^{(1)}$, $\Delta E_m^{(2)}, \ldots$ и, соответственно, $\Delta y_m^{(1)}$, $\Delta y_m^{(2)}, \ldots$ – малые поправки первого, второго и т.д. порядков малости. При этом в отсутствие вырождения в первом приближении

$$\Delta E_m^{(1)} = V_{mm} \text{ и } \Delta y_m^{(1)} = \sum_{n \neq m} \frac{V_{nm}}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} y_n^{(0)}, \tag{5.4}$$

где $V_{nm} = \int y_n^{(0)*} V y_m^{(0)} du$ (здесь du – элементарный объем). (5.5)

Коэффициенты V_{nm} образуют квадратную матрицу с бесконечным числом элементов и называются **матричными элементами возмущения**. Заметим, что диагональные матричные элементы V_{kk} представляют собой средние значения возмущения в соответствующем k-том стационарном состоянии.

Поправка второго порядка малости к энергии может быть вычислена по формуле

$$\Delta E_m^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{\left|V_{nm}\right|^2}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}. \tag{5.6}$$

Окончательно, во втором приближении по энергиям и первом – по волновым функциям стационарное состояние возмущенной системы описывается собственными значениями и собственными функциями вида:

$$E_m = E_m^{(0)} + V_{mm} + \sum_{n \neq m} \frac{|V_{nm}|^2}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \qquad (5.7а)$$

и

$$y_m = y_m^{(0)} + \sum_{n \neq m} \frac{V_{nm}}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} y_n^{(0)}. \qquad (5.7б)$$

Если уровень энергии невозмущенной системы $E_m^{(0)}$ вырожден, то наличие стационарного возмущения V приводит к снятию вырождения даже в нулевом приближении по волновым функциям. Так, если кратность вырождения невозмущенного энергетического уровня равна 2, то уровни энергии в m-том возмущенном стационарном состоянии E_{m1} и R_{m2} определяются как решения уравнения

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

где $W_{jk} = \int j_j^* V j_k du$, а j_1 и j_2 – ортогонализированные и нормированные на единицу собственные функции невозмущенной системы:

$$j_1 = a_1 y_{m1}^{(0)} + b_1 y_{m2}^{(0)},$$

$$j_2 = a_2 y_{m1}^{(0)} + b_2 y_{m2}^{(0)}, \quad ,$$

$$\int |j_{11}|^2 du = \int |j_{22}|^2 du = 1 \text{ и } \int j_1^* j_2 d\overset{\mathbf{r}}{r} = \int j_2^* j_1 du = 0.$$

5.1.2. Квантовые переходы. Электродипольное излучение

В теории квантовых переходов рассматривается вопрос о вероятности перехода системы из m-го стационарного состояния в n-ое под действием возмущения, зависящего не только от координат, но и от времени. Рассчитанная методом теории возмущений вероятность этого перехода за время действия возмущения T равна

$$P_{mn} = \left|C_{mn}^{(1)}\right|^2 = \frac{1}{\mathbf{h}^2} \left| \int_0^T V_{nm}(t) e^{i w_{nm} t} dt \right|^2, \qquad (5.8)$$

$$w_{mn} = \frac{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}{\mathbf{h}},$$

где $C_{mn}^{(1)}(t)$ – коэффициенты ряда (5.4), описывающего волновую функцию возмущенного состояния в первом приближении, если возмущение зависит от времени, и $V_{nm}(t)$ – матричный элемент этого возмущения.

Важнейшим случаем квантовых переходов являются переходы, вызванные взаимодействием электрона атома с внешним электромагнитным излучением. Используя преобразование Фурье, выражение (5.7) можно представить в виде

$$P_{mn} = \frac{4p^2}{\mathbf{h}^2} \left| \int_0^\infty \int y_n^{(0)*} V(w_{mn}) y_m^{(0)} du \right|^2 . \tag{5.8}$$

Здесь $V(w_{mn})$ - Фурье-амплитуда частоты w_{mn} возмущения. Таким образом,

$$P_{mn} = \frac{4p^2}{\mathbf{h}^2} \left| V_{nm}(w_{mn}) \right|^2 , \tag{5.9}$$

где $V_{nm}(w_{mn})$ – матричный элемент спектральной составляющей частоты w_{mn} возмущения, вызывающего квантовый переход. Таким образом, квантовый переход под действием внешнего излучения носит резонансный характер – переход возможен лишь в том случае, если в составе вынуждающего излучения имеется спектральная составляющая с частотой, равной боровской частоте w_{mn}.

В области длин волн, значительно превышающих характерные атомные размеры (справедливо в оптическом диапазоне длин волн), электрическую составляющую поля электромагнитной волны можно считать зависящей только от времени. Под действием этого поля $\vec{e}(t)$ электрон атома приобретает дополнительную энергию $V = -\left(\vec{D}\vec{e}\right)$, где $\vec{D} = e\vec{r}$ – дипольный момент электрона. Тогда для вероятности квантового перехода за время действия возмущения имеет место равенство:

$$P_{mn} = \frac{4p^2}{\mathbf{h}^2} \left| e(w_{mn}) \right|^2 \left| D_{nm} \right|^2 , \tag{5.10а}$$

где D_{nm} – матричные элементы дипольного момента электрона

$$D_{nm} = \int y_n^{(0)*} \vec{D}(\vec{r}) y_m^{(0)} du = e \int y_n^{(0)*} \vec{r} y_m^{(0)} du , \tag{5.10б}$$

а $e(w_{mn})$ – спектральная составляющая поля.

Из (5.10) можно получить выражение для вероятности квантового перехода в единицу времени:

$$W_{mn} = \frac{p}{3e_0 \mathbf{h}^2} r(w_{mn}) \left| D_{nm} \right|^2 , \tag{5.11}$$

где $r(w_{mn})$ – спектральная плотность вынуждающего излучения.

Окончательно можно сделать вывод о том, что квантовый переход из состояния m в состояние n возможен, если соответствующий матричный элемент дипольного момента отличен от нуля и, кроме того, в составе вынуждающего излучения присутствует спектральная составляющая с частотой, равной боровской частоте перехода.

Отличные от нуля матричные элементы дипольного момента определяют правила отбора для разрешенных переходов, сопровождающихся излучением (или поглощением) кванта с боровской частотой перехода. Для квантового гармонического осциллятора разрешенными являются переходы, для которых

$$\Delta n = \pm 1, \tag{5.12}$$

а для оптического электрона атома

$$\Delta n \neq 0, \quad \Delta l = \pm 1, \quad \Delta m = 0, \pm 1. \tag{5.13}$$

5.1.3. Элементарная квантовая теория излучения

Переходы между состояниями с энергией E_m и E_n в системе N невзаимодействующих атомов можно описывать с помощью коэффициентов Эйнштейна A_{mn}, B_{mn} и B_{nm} ($m > n$) – см. рис.5.1. В такой системе возможны спонтанные переходы из состояния с большей энергией в состояние с меньшей, сопровождающееся испусканием кванта энергии $\hbar w_m$. Вероятность таких переходов в единицу времени – A_{mn}; спонтанное излучение носит случайный характер, поэтому оно некогерентно. Вынужденные переходы под действием внешнего излучения возможны в обоих направлениях с одинаковой вероятностью перехода, определяемой выражениями (5.10) и (5.11). Коэффициенты $B_{mn} = B_{nm}$ представляют собой вероятность (5.11), отнесенную к единице спектральной плотности вынуждающего излучения, т.е.

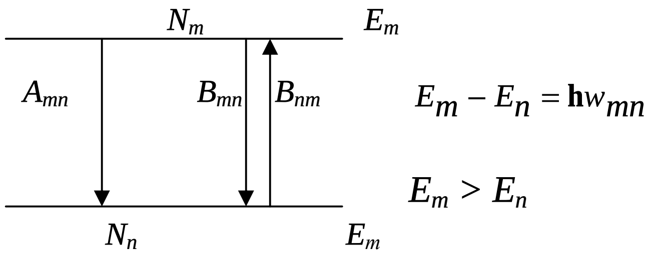


Рис.5.1

$$B_{mn} = B_{nm} = \frac{W_{mn}}{r(w_{mn})} = \frac{p}{3e_0\hbar^2}|D_{nm}|^2. \tag{5.14}$$

В отличие от спонтанного, вынужденное излучение является когерентным – оно характеризуется теми же фазой и поляризацией, что и вынуждающее излучение (вопрос о частоте обсуждался выше в п.5.1.2).

Вероятность спонтанных переходов A_{nm} рассчитывается лишь методами квантовой электродинамики (с точки зрения основных положений квантовой механики в стационарном состоянии атом может находиться как угодно долго). Однако в состоянии равновесия, когда среднее число переходов «сверху вниз» и «снизу вверх» одинаково, между коэффициентами A_{mn} и B_{mn} существует простая связь:

$$A_{mn} = B_{mn}\frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} = \frac{\omega_{mn}^3}{3\pi\varepsilon_0\hbar c^3}\left|\vec{D}_{nm}\right|^2. \tag{5.15}$$

В случае вырожденных энергетических уровней, переходы возможны между различными состояниями с энергиями E_m и E_n, для которых соответствующие матричные элементы дипольного момента отличны от нуля, т.е.

$$A_{mn} = \frac{\omega_{mn}^3}{3\pi\varepsilon_0\hbar c^3}\sum\left|\vec{D}_{nm}\right|^2. \tag{5.16}$$

Если m-ое состояние рассматривать как возбужденное, а n-ое – как основное, то опустошение возбужденных состояний системы атомов за счет спонтанных переходов происходит по закону

$$N(t) = N(0)e^{-At}, \tag{5.17}$$

где $N(t)$ – число атомов в возбужденном состоянии в момент времени t, а $N(0)$ – в начальный момент времени. При этом $t = \frac{1}{A}$ можно трактовать как время жизни атома в возбужденном состоянии.

Из уравнения Шредингера $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$ следует, что оператор $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ можно рассматривать как оператор энергии $\hat{E}$. Подобно перестановочному соотношению для координаты и сопряженного импульса, для операторов энергии и времени можно записать

$$\left[t, i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right] = -i\hbar.$$

Отсюда следует соотношение неопределенности для энергии и времени:

$$\Delta E\cdot\Delta t \approx h.$$

Если принять $\Delta t \approx \tau$, то – неопределенность энергии возбужденного стационарного состояния, и они связаны соотношением неопределенности

$$\Delta E\cdot t \approx h. \tag{5.18}$$

Тогда для частоты перехода получаем неопределенность

$$\Delta\omega\cdot t \approx 2\pi \quad \text{или} \quad \Delta\nu\cdot t \approx 1. \tag{5.19}$$

Величина $\Delta\nu$ определяет естественную ширину спектральной линии, измеряя которую можно найти время жизни атома в возбужденном состоянии.

5.2. Примеры решения задач

Задача 1. Найти поправку к уровням энергии атома водорода за счет релятивистской зависимости массы электрона от его скорости.

Решение

Гамильтониан системы $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r)$, а $\frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{\hat{p}^2}{2m_0}\sqrt{1-b^2}$, где $b^2 = \frac{v^2}{c^2} << 1$. Т.к. $\sqrt{1-b^2} \approx 1 - \frac{1}{2}b^2$, то

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{\hat{p}^2}{2m_0}\left(1 - \frac{1}{2}b^2\right) = \hat{T}^{(0)} - \frac{\hat{p}^4}{4m_0^3c^2}.$$

Следовательно, $\hat{H}^{(0)} = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + U(r) = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} - \frac{e^2}{4pe_0 r}$, а возмущение

$$V = -\frac{\hat{p}^4}{4m_0^3c^2}.$$

Решениями для невозмущенной системы являются стационарные состояния с энергиями $E_n^{(0)}$ и принадлежащими им собственные функции $y_{nlm}^{(0)}$ (см. п.4.2). Поэтому

$$\Delta E_n^{(1)} = \bar{V} = \int y_{nlm}^{(0)*}\left(-\frac{\hat{p}^4}{4m_0^3c^2} y_{nlm}^{(0)}\right)du\,. \tag{1}$$

Учтем, что $\frac{\hat{p}^2}{2m_0} y_{nlm}^{(0)} = \left(E_n^{(0)} + \frac{e^2}{4pe_0 r}\right) y_{nlm}^{(0)}$. Тогда действие оператора возмущения в (1) можно представить так:

$$-\frac{\hat{p}^4}{4m_0^3c^2} y_{nlm}^{(0)} = -\frac{1}{m_0c^2}\left[\frac{\hat{p}^2}{2m_0}\left(\left(E_n^{(0)} + \frac{e^2}{4pe_0 r}\right) y_{nlm}^{(0)}\right)\right].$$

Т.к. $\hat{p}^2 = -\mathbf{h}^2\Delta$ – дифференциальный оператор, то выполняя действие оператора кинетической энергии на выражение в скобках, получаем:

$$-\frac{\hat{p}^4}{4m_0^3c^2} y_{nlm}^{(0)} = -\frac{1}{m_0c^2}\left[\left(E_n^{(0)} + \frac{e^2}{4pe_0 r}\right)^2 y_{nlm}^{(0)} + y_{nlm}^{(0)} \cdot \frac{\hat{p}^2}{2m_0}\left(\frac{e^2}{4pe_0 r}\right)\right].$$

При получении этого выражения было учтено, что $E_n^{(0)} = const$. Теперь выражение для первой поправки (1) можно представить так:

$$\Delta E_n^{(1)} = -\frac{E_n^{(0)^2}}{m_0c^2}\int\left|y_{nlm}^{(0)}\right|^2 du - \frac{2E_n^{(0)}}{m_0c^2}\int\left|y_{nlm}^{(0)}\right|^2 \frac{e^2}{4pe_0 r}du -$$

$$-\frac{1}{m_0c^2}\int\left|y_{nlm}^{(0)}\right|^2\left(\frac{e^2}{4pe_0 r}\right)^2 du - \frac{1}{m_0c^2}\int\left|y_{nlm}^{(0)}\right|^2 \cdot \frac{\hat{p}^2}{2m_0}\left(\frac{e^2}{4pe_0 r}\right)\cdot du\,. \tag{2}$$

При этом с учетом соотношений, представленных в Приложении Ж, имеем

$$-\frac{E_n^{(0)^2}}{m_0c^2}\int\left|y_{nlm}^{(0)}\right|^2 du=-\frac{E_n^{(0)^2}}{m_0c^2},$$

$$-\frac{2E_n^{(0)}}{m_0c^2}\int\left|y_{nlm}^{(0)}\right|^2\frac{e^2}{4pe_0r}du=\frac{2E_n^{(0)}}{m_0c^2}\overline{U_n^{(0)}}=\frac{4E_n^{(0)^2}}{m_0c^2},$$

$$-\frac{1}{m_0c^2}\int\left|y_{nlm}^{(0)}\right|^2\left(\frac{e^2}{4pe_0r}\right)^2du=-\frac{\overline{U_n^{(0)^2}}}{m_0c^2}=-\frac{e^4}{16p^2e_0^2}\frac{1}{m_0c^2n^3(l+1/2)a^2}=$$

$$=-\frac{U_n^{(0)^2}}{m_cc^2}\frac{n}{(l+1/2)}=-2E_n^{(0)^2}\frac{n}{(l+1/2)}.$$

Что касается последнего интеграла, то он равен нулю. Действительно, т.к.

$$\hat{p}^2=-\mathbf{h}^2\Delta=-\mathbf{h}^2\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\Delta_{J,j}\right),$$

то $\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\right)\right)=0$. Поэтому выражение для первой поправки к энергии n-го стационарного состояния имеет вид:

$$\Delta E_n^{(1)}=\frac{E_1^{(0)^2}}{m_0c^2n^4}\left(-1+4-\frac{2n}{l+1/2}\right)=-\frac{E_1^{(0)^2}}{m_0c^2n^4}\left(\frac{2n}{l+1/2}-3\right).$$

Напомним, что для атома водорода $E_n^{(0)}=-\frac{e^4m_0}{32p^2e_0^2\mathbf{h}^2n^2}=\frac{E_1^{(0)}}{n^2}$.

Полученный результат можно представить в стандартном виде:

$$\Delta E_n^{(1)}=-\frac{a^2\mathbf{h}^2R}{n^4}\left(\frac{n}{l+1/2}-\frac{3}{2}\right),$$

где R – постоянная Ридберга, а $a=\frac{e^2}{4pe_0\mathbf{h}c}=\frac{1}{137}$ – постоянная тонкой структуры.

Задача 2. Вычислить время жизни и ширину энергетического уровня атома водорода в $2p$-состоянии относительно перехода в основное состояние.

Решение

Время жизни атома в возбужденном состоянии t равно обратной величине вероятности спонтанного перехода $2p$ – $1s$ в единицу времени. Энергетический уровень 2р-состояний является трехкратно вырожденным (состояния с собственными функциями y_{210}, y_{211}, $y_{21,-1}$), а энергетический уровень E1 с собственной функцией y_{100} – не вырожден. Поэтому, в соответствии с (5.15) и (5.16),

$$\frac{1}{t} = \frac{w_{21}^3}{3pe_0\mathbf{h}c^3}\left(\left|\vec{D}_{210:100}\right|^2 + 2\left|\vec{D}_{21,\pm1:100}\right|^2\right). \qquad (1)$$

Прежде всего, для упрощения записей обозначим переходы $p \to s$ нижними индексами 21, а переходы из p-состояний, отличающихся значениями магнитного квантового числа, – верхними индексами 1 (m = 0) и 2 (m = ±1). Кроме того, учтем, что $\vec{D} = e\vec{r}$. Тогда (1) можно записать так:

$$\frac{1}{t} = \frac{w_{21}^3 e^2}{3pe_0\mathbf{h}c^3}\left(\left|\vec{r}_{21}^{(1)}\right|^2 + 2\left|\vec{r}_{21}^{(2)}\right|^2\right).$$

Для вычисления матричных элементов проекций $\vec{r}_{21}^{(1,2)}$ введем проекции радиус-вектора в сферических координатах

$$x = r\sin J\cos j, \quad y = r\sin J\sin j, \quad z = r\cos J.$$

Т.к. $r^2 = r^2\sin^2 J(\cos^2 j + \sin^2 j) + r^2\cos^2 J = r_\perp^2 + z^2$, где $r_\perp$ – проекция радиус-вектора на плоскость, перпендикулярную оси Z. С другой стороны, если

$$x = x \pm iy = r_\perp e^{\pm ij}, \text{ то } |x|^2 = r_\perp^2.$$

Тогда можно вычислять матричные элементы величин z и ξ по формулам:

$$\begin{aligned} x_{21}^{(1)} &= \int y_{100}^{(0)*} r\sin J\, y_{210}^{(0)} r^2 \sin J\, dJ\, e^{\pm ij}\, dj, \\ z_{21}^{(1)} &= \int y_{100}^{(0)*} r\cos J\, y_{210}^{(0)} r^2 \sin J\, dJ\, dj; \end{aligned} \quad \text{– для перехода } 210 \to 100;$$

и

$$\begin{aligned} x_{21}^{(2)} &= \int y_{100}^{(0)*} r\sin J\, y_{21,\pm1}^{(0)} r^2 \sin J\, dJ\, e^{\pm ij}\, dj, \\ z_{21}^{(2)} &= \int y_{100}^{(0)*} r\cos J\, y_{21,\pm1}^{(0)} r^2 \sin J\, dJ\, dj; \end{aligned} \quad \text{– для перехода } 21{\pm}1 \to 100.$$

С помощью таблиц Приложения Ж выполним вычисления.

<u>Переход 210 → 100:</u>

$$x_{21}^{(1)} = \int_0^\infty R_{10}R_{21}r^3 dr \iint Y_{00}Y_{10}\sin^2 J\, dJ\, e^{\pm ij}\, dj =$$

$$= \frac{2}{a^3\sqrt{6}}\frac{\sqrt{3}}{4p}\int_0^\infty \frac{r}{a}e^{-\frac{3r}{2a}} r^3 dr \int_0^p \sin^2 J\cos J\, dJ \int_0^{2p} e^{\pm ij}\, dj = 0,$$

$$z_{21}^{(1)} = \int_0^\infty R_{10}R_{21}r^3dr\iint Y_{00}Y_{1,\pm1}\cos J\sin J\,dJ\,dj =$$

$$= \frac{2}{a^3\sqrt{6}}\frac{\sqrt{3}}{4p}\int_0^\infty \frac{r}{a}e^{-\frac{3r}{2a}}r^3dr\int_0^p \sin J\cos^2 J\,dJ\int_0^{2p} dj =$$

$$= \frac{2}{\sqrt{2}a^4}\frac{1}{3}\int_0^\infty e^{-\frac{3r}{2a}}r^4dr = \frac{2^9}{3^4\sqrt{2}}a.$$

Следовательно, $\left|\mathbf{r}_{21}^{(1)}\right|^2 = z_{21}^{(1)2} = \frac{2^{17}}{3^8\sqrt{2}}a^2 \approx \left(\frac{2}{3}\right)^8 2^9a^2 \approx 10^{8\ln 0,66}10^{9\ln 2}a^2 \approx 10^3a^2$.

<u>Переход $21,\pm1 \to 100$:</u>

$$x_{21}^{(1)} = \int_0^\infty R_{10}R_{21}r^3dr\iint Y_{00}Y_{1б\pm1}\sin^2 J\,dJ\,e^{\pm ij}\,dj =$$

$$= \frac{2}{a^3\sqrt{6}}\frac{\sqrt{8}}{4p}\int_0^\infty \frac{r}{a}e^{-\frac{3r}{2a}}r^3dr\int_0^p \sin^3 J\,dJ\int_0^{2p} e^{i(\pm j\mp j)}dj = \frac{2^{11}}{3^5\sqrt{3}}a^2,$$

$$z_{21}^{(1)} = \int_0^\infty R_{10}R_{21}r^3dr\iint Y_{00}Y_{1,\pm1}\cos J\sin J\,dJ\,dj =$$

$$= \frac{2}{a^3\sqrt{6}}\frac{\sqrt{8}}{4p}\int_0^\infty \frac{r}{a}e^{-\frac{3r}{2a}}r^3dr\int_0^p \sin^2 J\cos J\,dJ\int_0^{2p} e^{\pm ij}\,dj = 0.$$

Таким образом,

$$\left|\mathbf{r}_{21}^{(2)}\right|^2 = \left|x_{21}^{(2)}\right|^2 = \frac{2^{22}}{3^{11}}a^2 = \left(\frac{2}{3}\right)^{11}2^{11}a^2 \approx 10^{11\ln 0,66}10^{11\ln 2}a^2 \approx$$

$$\approx 10^{11(\ln 0,66+\ln 2)} \approx 10^3a^2.$$

Тогда $\left|\mathbf{r}_{21}^{(1)}\right|^2 + 2\left|\mathbf{r}_{21}^{(2)}\right|^2 \approx 3\cdot10^3a^2$,

а время жизни атома в возбужденном $2p$-состоянии определяется так:

$$t = \frac{pe_0\mathbf{h}c^3}{w_{21}^3e^2a^2}10^{-3}(\text{c}^{-1}).$$

Подстановка числовых значений ($w_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\mathbf{h}} = \frac{3|E_1|}{4\square}$; $|E_1| = 13,6$ эВ, $a = 0,529\,\mathring{A}$), получаем время жизни в возбужденном состоянии $t \approx 10^{-9}$ с.

С использованием соотношения неопределенностей между энергией и временем, получаем ширину возбужденного $2p$-уровня:

$$\Delta E \approx \frac{\hbar}{t} \approx 10^{-25}\ \text{Дж} = 10^{-6}\ \text{эВ}.$$

5.3. Задания для самостоятельной работы

5.1. На частицу массой m_0, находящуюся в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме шириной a, наложено малое возмущение $V = V_0 \cos\frac{2\pi}{a}x$. Определить поправки первого порядка малости к энергиям стационарных состояний.

Ответ: $\Delta E_n^{(1)} = V_{nn} = 0;\quad \Delta E_n^{(2)} = \frac{V_0^2}{2E_1^{(0)}}\frac{1}{n^2-4}$ *при* $m \neq 2$ *и* $\Delta E_m^{(2)} = \frac{V_0^2}{2E_1^{(0)}}\frac{1}{4m^2-4}$ *при* $m \neq n$.

5.2. Найти первую и вторую поправки к энергии квантового осциллятора массой m_0 в основном состоянии (n = 0) за счет ангармонизма колебаний, описываемого добавкой к потенциальной энергии $V = \beta x^3,\quad \beta = const$.

Ответ: $\Delta E_0^{(1)} = 0;\quad \Delta E_0^{(2)} = \frac{11\beta^2\hbar^2}{8m_0^3\omega^4}$.

5.3. Найти первую и вторую поправки к энергии квантового осциллятора массой m_0 в состоянии с n = 1 за счет ангармонизма колебаний, описываемого добавкой к потенциальной энергии $V = \beta x^3,\quad \beta = const$.

Ответ: $\Delta E_0^{(1)} = 0;\quad \Delta E_0^{(2)} = \frac{71\beta^2\hbar^2}{8m_0^3\omega^4}$.

5.4. На одномерный гармонический осциллятор с зарядом e действует электрическое поле напряженностью $\vec{\varepsilon}$, направленной вдоль оси x. Найти первую поправку к энергии основного состояния (n=0) и состояния с n = 1.

Ответ: $\Delta E_0^{(1)} = \Delta E_1^{(1)} = -\frac{e^2\varepsilon^2}{2m_0\omega^2}$.

5.5. В плоскости XOY вращается жесткий ротатор с моментом инерции J и электрическим дипольным моментом $\vec{D}$. Исследовать влияние однородного электрического поля напряженностью $\vec{e}$, направленной вдоль оси *X*, на уровни энергии ротатора.

$$\textit{Ответ:}\ E_m^{(0)}=\frac{m^2\hbar^2}{2J};\quad \Delta E_m^{(1)}=0;\quad \Delta E_m^{(2)}=\left(\frac{De}{\hbar}\right)^2\frac{J}{4m^2-1}.$$

5.6. Для условия задачи 5.5 определить возмущенные электрическим полем волновые функции плоского ротатора в первом приближении теории возмущений.

$$\textit{Ответ:}\ \psi_m=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}+\frac{1}{2}De\left[\frac{e^{i(m+1)\varphi}}{2m+1}-\frac{e^{i(m-1)\varphi}}{2m-1}\right].$$

5.7. Пространственный ротатор с моментом инерции J и электрическим дипольным моментом $\vec{D}$ помещен в однородное электрическое поле напряженностью $\vec{e}$. Найти первую, не равную нулю, поправку к энергии основного состояния ротатора.

$$\textit{Ответ:}\ \Delta E=-\frac{1}{3}\left(\frac{De}{\hbar}\right)^2 J.$$

5.8. Атом водорода находится в однородном электрическом поле напряженностью $\vec{e}$, направленной вдоль оси *Z*. Найти расщепление уровня энергии, определяемого главным квантовым числом n = 2 (эффект Штарка).

Ответ: $\Delta E_2^{(1)}=\pm 3ee\,a$ *для* l = 1, m = ± 1; $\Delta E_2^{(1)}=0$ *для* l = 1, m = 0 *и* l = 0, m = 0.

5.9. Для двукратно вырожденного уровня, определить поправки первого порядка и правильные функции нулевого приближения, если оператор возмущения зависит от времени.

$$\Delta E^{(1)}=\frac{1}{2}\left(V_{11}+V_{22}\pm\hbar\omega^{(1)}\right);\quad \psi^{(0)}=C_1\psi_1^{(0)}+C_2\psi_2^{(0)};$$

$$\textit{Ответ:}\ \omega^{(1)}=\frac{1}{\hbar}\sqrt{\left(V_{11}+V_{22}\right)^2+4\left|V_{12}\right|^2},$$

$$C_1=\left[\frac{V_{12}}{2|V_{12}|}\left(1\pm\frac{V_{11}-V_{22}}{\hbar\omega^{(1)}}\right)\right]^{1/2},\quad C_2=\pm\left[\frac{V_{21}}{2|V_{21}|}\left(1\mp\frac{V_{11}-V_{22}}{\hbar\omega^{(1)}}\right)\right]^{1/2}.$$

5.10. Плоский заряженный ротатор помещен в слабое однородное магнитное поле, индукция которого $\vec{B}$ перпендикулярна плоскости движения. С использованием теории возмущений найти в первом приближении энергию и волновые функции стационарных состояний ротатора. Заряд ротатора e_0, масса m_0.

Ответ:
$$E_m = E_m^{(0)} - m\mu_Б B; \quad \psi_m = \psi_m^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi};$$
$$\mu_Б = \frac{e_0\hbar}{2m_0}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

5.11. На заряженный линейный гармонический осциллятор в основном состоянии начинает действовать однородное электрическое поле напряженностью $\vec{\mathcal{E}}$, направленной вдоль оси осциллятора. Определить вероятность перехода осциллятора в первое возбужденное состояние под действием этого возмущения.

Ответ: $W_{01} = \dfrac{\xi^2 e^{-\xi^2/2}}{2}; \quad \xi^2 = \dfrac{e^2\mathcal{E}^2}{m_0\hbar\omega^2}.$

5.12. Получить правила отбора для пространственного ротатора в электродипольном приближении, если его момент инерции равен *J*.

Ответ: $\Delta l = \pm 1, \quad \Delta m = 0, \pm 1.$

5.13. Определить первую поправку к энергии основного состояния водородоподобного донорного электрона, обусловленную экранированием потенциала взаимодействия свободными носителями заряда. Потенциальная энергия донорного электрона определяется формулой $U = \dfrac{e_0^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon r} e^{-\kappa r}$ при $\kappa r \ll 1$ ($1/\kappa$ – дебаевский радиус экранирования).

Ответ: $\Delta E^{(1)} = \dfrac{e_0^2 \kappa}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon}.$

6. СПИН ЭЛЕКТРОНА. КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА АТОМА

6.1. Многоэлектронные атомы

6.1.1. Краткие теоретические сведения

6.1.1.1. Спин электрона

Экспериментально установлено, что электрон обладает собственным магнитным моментом, который может быть ориентирован лишь двумя способами относительно магнитного поля. При этом проекция собственного магнитного момента электрона равна магнетону Бора:

$$m_z = \pm m_Б = \pm\frac{e_0\hbar}{2m_0} = \pm 0{,}927\cdot 10^{-23}\,\text{Дж/Тл}.$$

Наличие магнитного момента электрона $\vec{m}$ обусловлено собственным механическим моментом – спином $\vec{S}$ (по-прежнему, под векторами понимаются прецессирующие векторы), причем

$$S^2 = \hbar^2 l_s(l_s+1),\quad S_z = m_s\hbar,\quad l_s = \frac{1}{2},\quad m_s = \pm\frac{1}{2}.$$

Механический и магнитный моменты, обусловленные орбитальным движением электрона в водородоподобном атоме, связаны гиромагнитным отношением

$$M_z = -g\,L_z,\ \text{где}\ g = \frac{e_0}{2m_0}.$$

Для собственных магнитного и механического моментов

$$m_z = -g_s S_z,\ \text{где}\ g_s = \frac{e_0}{m_0} = 2g\ .$$

Полный механический момент электрона в атоме

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}\ .$$

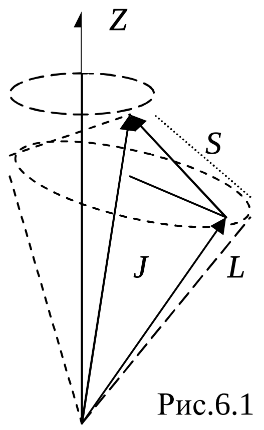


Рис.6.1

При этом

$$J^2 = \hbar^2 j(j+1) \quad \text{и} \quad J_z = m_j\hbar, \quad \text{где}$$

$m_j = -j, (-j+1), ..., (j-1), j$,

а квантовое число j принимает два значения $j = l \pm \frac{1}{2}$.

При движении в центральном поле модуль полного механического момента и его проекция являются квантово-механическими интегралами движения. На рис.6.1 схематически показано сложение прецессирующих векторов $\vec{L}$ и $\vec{S}$ (вектор $\vec{J}$ прецессирует относительно оси Z).

Наличие у электрона внутренней векторной характеристики – спина – приводит к тому, что состояние электрона в атоме водорода определяется четырьмя квантовыми числами – n, l, m и m_s. Соответственно, волновая функция электрона $\psi = \psi(n,l,m,m_s)$. В отсутствие спин-орбитального взаимодействия

$$\psi(n,l,m,m_s) = \psi(n,l,m) \cdot \psi(m_s),$$

причем $\psi(m_s)$ – не более чем знак, указывающий ориентацию спина.

С полным механическим моментом J и его проекцией связаны правила отбора для возможных электродипольных переходов:

$$\Delta j = 0, \pm 1; \quad \Delta m_j = 0, \pm 1.$$

Спин-орбитальное взаимодействие снимает вырождение в кулоновском поле по орбитальному квантовому числу («l» – вырождение) и приводит к дублетной структуре спектров водородоподобных атомов и атомов щелочных металлов с одним оптическим (валентным) электроном. На рис.6.2 схематически показано образование таких дублетов.

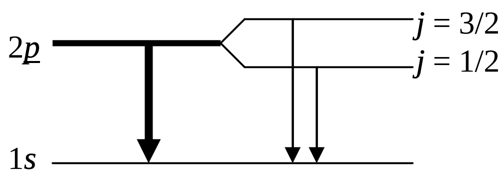


Рис.6.2

Спином обладает не только электрон. Спин – одна из основных внутренних характеристик элементарных частиц, причем спин может быть как полуцелым (электрон, протон, нейтрон и др), так и целочисленным (фотон, π-мезоны и др.)

6.1.1.2. Системы тождественных микрочастиц. Многоэлектронные атомы

В системе тождественных микрочастиц возможны квантовые переходы, не сопровождающиеся изменением состояния системы. К таким переходам относится перестановка частиц местами. Так, в системе из двух частиц перестановка их местами может привести лишь к изменению знака волновой функции:

$$\psi(1,2) = \pm\psi(2,1).$$

Волновые функции, не меняющие знак при перестановке пары частиц местами, называются симметричными, а меняющие знак – антисимметричными. В свою очередь, симметричные волновые функции описывают системы тождественных частиц с целочисленным спином (бозонов), а антисимметричные – системы частиц с полуцелым спином (фермионы).

В случае невзаимодействующих частиц волновая функция системы строится как симметричная (антисимметричная) комбинация одночастичных волновых функций. Для двух частиц

$$\psi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_a(1)\psi_b(2) \pm \psi_a(2)\psi_b(1)\right), \qquad (6.1)$$

где знак (+) относится к системе бозонов, а знак (-) – к системе фермионов; под индексами a и b понимаются совокупности квантовых чисел, характеризующих состояния каждой из частиц. Коэффициент $\frac{1}{\sqrt{2}}$ – нормировочный.

Для системы фермионов справедлив принцип запрета Паули: **вероятность обнаружить в системе фермионов хотя бы две частицы одинаковых квантовых состояниях равна нулю.** Это утверждение непосредственно следует из (5.1). В применении к электронам атома принцип Паули формулируется так: в многоэлектронном атоме не существует электронов с одинаковой четверкой квантовых чисел n, l, m и m_s.

Простейшей двухэлектронной системой является атом гелия. Даже в нулевом приближении теории возмущений, пренебрегая взаимодействием электронов, учет спинов приводит к образованию двух экспериментально наблюдаемых модификаций гелия – парагелия и ортогелия. Волновая функция такой двухэлектронной системы

$$y(1,2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(y_a(1)y_b(2)\pm y_a(2)y_b(1)\right)y(S_{z1},S_{z2}), \qquad (6.2)$$

где $y_a(1), y_b(2), y_a(2), y_b(1)$ – волновые функции, зависящие только от координат и определяемые тройками квантовых чисел n, m и l (координатная часть волновой функции в выражении (6.2)), а $y(S_{z1},S_{z2})$ – спиновая часть волновой функции. Т.к. $y(1,2)$ антисимметрична, то координатная часть симметрична, если спиновая – антисимметрична, и наоборот. Антисимметричной спиновой волновой функции соответствует антипараллельная ориентация спинов электронов (синглетное состояние), которые могут иметь одинаковую тройку квантовых чисел. Симметричная спиновая функция реализуется тремя возможными проекциями полного спина: $S_z=-1,0,1$ (триплетное состояние). Учет взаимодействия электронов как малого возмущения приводит к снятию вырождения и появлению пары спектральных серий парагелия и ортогелия. При этом энергия системы

$$E=E_a+E_b+K\pm A \qquad (6.3)$$

(знак (+) относится к синглетному состоянию, а знак (-) – к триплетному), где K – средняя энергия кулоновского взаимодействия электронов, A – обменный интеграл, описывающий обменное взаимодействие, обусловленное перекрытием волновых функций электронов и не имеющее классических аналогов.

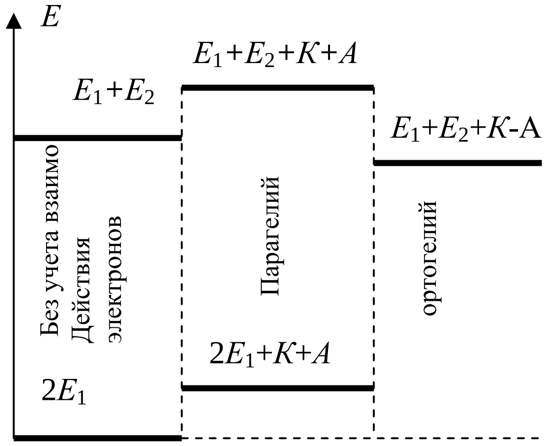


Рис.6.3

$$A=\iint y_a^*(1)y_b^*(2)\frac{e^2}{4pe_0r_{12}}y_a(2)y_b(1)du_1du_2=$$

$$=\iint y_a^*(2)y_b^*(1)\frac{e^2}{4pe_0r_{21}}y_a(1)y_b(2)du_1du_2.$$

На рис.6.3 схематически представлена

схема расщепления уровней энергии атома гелия, обусловленного обменным взаимодействием (реальная картина расщепленных уровней с учетом кулоновского вырождения значительно сложнее). На рис.6.3 E_1 – энергия основного состояния электрона, E_2 – первого возбужденного.

В многоэлектронном атоме, благодаря принципу запрета Паули, движение каждого из электронов можно считать практически независимым от движения остальных электронов. Поэтому состояние электронов, по-прежнему, можно описывать четверкой квантовых чисел. Идеализированная схема заполнения электронами оболочек (состояний с определенным значением главного квантового числа) и подоболочек (состояний с определенным значением орбитального квантового числа) представлена в таблице 1 Приложения 3. Однако экранирование всеми электронами (кроме рассматриваемого) заряда ядра приводит к слабой зависимости энергии электрона от орбитального квантового числа – при заданном n энергия слабо увеличивается с ростом l, что отражается характером заполнения электронами подоболочек атомов в периодической системе элементов Д.И.Менделеева, которая также представлена в Приложении 3. Наблюдаемые отклонения от описанной схемы обусловлены увеличением влияния взаимодействия электронов с ростом порядкового номера элемента; кроме того, в тяжелых атомах начинает оказывать влияние и спин-орбитальное взаимодействие. Электронная конфигурация атома представляется записью в виде числового обозначения главного квантового числа (номера оболочки), буквенного обозначения орбитального квантового числа (подоболочки) и обозначением числа электронов в подоболочке верхним индексом. Так, электронная конфигурация ^{25}Mn: $\underline{1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2}$ или $\underline{[Ar]: d^5 4s^2}$.

6.1.1.3. Векторная модель атома

Знание электронной конфигурации не дает однозначной информации о возможных (в том числе и основном) состояниях атома, которые определяются его полным механическим моментом. В свою очередь, полный механический момент атома складывается из орбитальных и спиновых моментов всех электронов. При этом возможны два способа сложения моментов:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}, \quad \vec{L} = \sum \vec{L}_i, \quad \vec{S} = \sum \vec{S}_i \quad \text{и} \quad \vec{J} = \sum \vec{J}_i, \quad \vec{J}_i = \vec{L}_i + \vec{S}_i . \qquad (6.4)$$

Первый тип связи (связь Рассел-Саундерса или l–s связь) реализуется в атомах в том случае, когда кулоновская энергия взаимодействия электронов превышает энергию спин-орбитального взаимодействия. Второй тип связи – j-j связь – реализуется в противном случае. В дальнейшем, если специально не оговаривается, подразумевается приближение Рассел-Саундерса.

Т.к. орбитальный, спиновый и полный моменты электронов, образующих заполненную оболочку, равны нулю, и такая электронная конфигурация соответствует инертным газам, то физические (в частности, оптические) и химические свойства атомов элементов определяются электронами незаполненных оболочек и подоболочек. Поэтому в спектроскопии принято состояние атомов определять орбитальным квантовым числом всех электронов в незаполненных состояниях, их полным спином и полным механическим моментом. В отличие от одного электрона, при записи соответствующих квантовых чисел и обозначений состояний атома применяются заглавные буквы. Так,

	$l \to L$		$s \to S,$	$f \to F$
квантовые числа	$l_s \to S$	состояния	$p \to P,$	$g \to G$
	$j \to J$		$d \to D,$	$h \to H$

При этом, по-прежнему,

$$\left|\vec{L}\right|^2 = \hbar^2 L(L+1), \quad \left|\vec{S}\right|^2 = \hbar^2 S(S+1), \quad \hbar^2 J(J+1). \tag{6.5}$$

Состояние атома записывается в форме $\boxed{{}^{2S+1}L_J}$, (6.6)

например, состояние атома ${}^{5/2}D_{1/2}$ означает, что атом находится в состоянии с $I = 2$, $S = 3/2$ и $J = 1/2$.

Заданной электронной конфигурации атома с определенными значениями L и S соответствуют $(2S+1)(2L+1)$ состояний, называемых **термами,** которые отличаются значениями и ориентацией полного момента $\vec{J}$. Величина $(2S+1)$ называется мультиплетностью терма. Спин-орбитальное взаимодействие приводит к частичному снятию вырождения и расщеплению термов: энергетический уровень расщепляется на $(2S+1)$ подуровней, если $L > S$ и $(2L+1)$ – если $L < S$. Тонкая структура спектров атомов образуется квантовыми переходами, подчиняющимися правилам отбора:

$$\Delta L = \pm 1, \qquad \Delta J = 0, \pm 1. \tag{6.7}$$

Основной терм атома с заданной электронной конфигурацией можно определить с помощью эмпирических правил Хунда:

1) из всех термов минимальной энергии соответствует терм с максимальной мультиплетностью;

2) если существует несколько термов с максимальной мультиплетностью, то основным является терм с наибольшим значением L;

3) при заданных L и S минимальной энергии соответствует терм с $J = |L - S|$ если подоболочка заполнена менее чем наполовину, и $J = L + S$, если оболочка заполнена более чем наполовину.

<u>Вычисление полных моментов</u>. Правила сложения орбитальных моментов основаны на том, что проекция полного момента равна алгебраической сумме проекций слагаемых моментов (при условии выполнения принципа Паули). Это положение приводит к тому, что при сложении двух орбитальных моментов l_1 и l_2 суммарный момент L_{12} принимает значения

$$L_{12} = (l_1 + l_2), (l_1 + l_2 - 1), \ldots, |l_1 - l_2|, \tag{6.8}$$

причем каждому из совместимых с принципом Паули значению L_{12} соответствует $(2L_{12}+1)$ значений магнитного квантового числа m_{12}. Каждый последующий момент суммируется с полученными значениями по тому же правилу.

Аналогичным образом суммируются и спиновые моменты отдельных электронов. Полный механический момент атома определяется квантовым числом J, принимающим значения

$$J = (L+S), (L+S-1), ..., |L-S|, \tag{6.9}$$

где L и S – суммарные орбитальный и спиновый моменты электронов атома.

6.1.2. Примеры решения задач

Задача 1. Система из трех электронов с орбитальными моментами, определяемыми квантовыми числами $l_1 = 1$, $l_2 = 2$, $l_3 = 3$, находится в S-состоянии. Найти угол между двумя первыми моментами.

Решение

Складывая первые два момента в соответствии с правилом суммирования (6.5), получаем следующие значения квантового числа l_{12}:

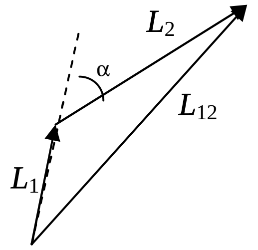
$l_{12} = 3, 2, 1.$

После сложения l_{12} с орбитальным квантовым числом третьего электрона получаем

$$l_{123} = L = \begin{cases} 6,5,4,3,2,1,0; \\ \quad 5,4,3,2,1; \\ \qquad 4,3,2; \end{cases}$$

т.е. L = 6,5,4,3,2,1,0, и результирующее S-состояние реализуется при сложении l_{12} = 3. Таким образом, для квадратов модулей моментов импульса $\vec{L}_1$, $\vec{L}_2$ и $\vec{L}_{12}$ можно записать

$$\left|\vec{L}_1\right|^2 = \hbar^2 l_1(l_1+1) = 2\hbar^2, \; \left|\vec{L}_2\right|^2 = \hbar^2 l_2(l_2+1) = 6\hbar^2, \; \left|\vec{L}_{12}\right|^2 = \hbar^2 l_{12}(l_{12}+1) = 12\hbar^2.$$



Векторное сложение орбитальных моментов первых двух электронов представлено на рисунке, из которого следует, что

$$L_{12}^2 = L_1^2 + L_2^2 + 2L_1L_2\cos\alpha .$$

Отсюда получаем

$$\cos\alpha = \frac{L_{12}^2 - L_1^2 - L_2^2}{2L_1L_2} = \frac{12-6-2}{2\sqrt{2}\sqrt{6}} = \frac{1}{\sqrt{3}}.$$

Задача 2. Найти возможные термы системы из двух *p*-электронов а) с разными главными квантовыми числами; б) с одинаковыми главными квантовыми числами (эквивалентные электроны). Определить термы основного состояния для каждой из электронных конфигураций.

Решение

а) Система с $n_1 \neq n_2$.

В рассматриваемой системе $l_1 = l_2 = 1; \quad m_1 = m_2 = 0, \pm 1$. Поэтому

$$m_{12} = m_1 + m_2 = \begin{cases} 2,1,0 \\ \;\; 1,0,-1 \\ \;\;\;\; 0,-1,-2 \end{cases} \quad \text{или} \quad m_{12} = \begin{cases} -2,-1,0,1,2 & \Rightarrow \; L = 2 \;\; (D) \\ \;\; -1,0,1 & \Rightarrow \; L = 1 \;\; (P). \\ \;\;\;\; 0 & \Rightarrow \; L = 0 \;\; (S) \end{cases}$$

Т.к. $n_1 \neq n_2$, то возможна реализация как триплетных состояний *D*, *P* и *S*, так и синглетных, т.е. $S = S_{12} = 1, 0$. Для триплетных термов

$$S = 1, \;\; S_z = \begin{cases} -1 & \downarrow\downarrow, \\ \;\; 0 & \rightarrow\rightarrow, \\ \;\; 1 & \uparrow\uparrow. \end{cases}$$

Для синглетных состояний $S = 0$, $S_z = 0$ ($\uparrow\downarrow$).

Соответственно, для триплетных термов с мультиплетностью (2S+1)=3

$$J = (L+S), (L+S-1), ..., |L-S| = \begin{cases} 3,2,1 & (D), \\ \;\; 2,1,0 & (P), \\ \;\;\;\; 1 & (S), \end{cases}$$

а для синглетных мультиплетность равна единице и $J = L$.

Таким образом, возможными триплетными термами являются:

$$^3D_3, \;\; ^3D_2, \;\; ^3D_1, \;\; ^3P_2, \;\; ^3P_1, \;\; ^3P_0, \;\; ^3S_1$$

или (без учета спин-орбитального расщепления) – $^3D, \;\; ^3P, \;\; ^3S$.

Для синглетных термов получаем $^1D, \;\; ^1P, \;\; ^1S$.

В соответствии с правилами Хунда основному состоянию соответствует терм $^3D_1$.

б) Эквивалентные электроны ($n_1 = n_2 = m$)

В этом случае в соответствии с принципом Паули возможна реализация состояний с $m_1 = m_2$ лишь при условии противоположной ориентации спинов. Поэтому схема сложения проекций орбитальных и спиновых моментов выглядит так:

$$m_{12} = m_1 + m_2 = \begin{cases} 2(\uparrow\downarrow), \; 1(\uparrow\downarrow, \uparrow\uparrow), \; 0(\uparrow\downarrow, \uparrow\uparrow) \\ \;\; 1(\uparrow\downarrow, \uparrow\uparrow), \; 0(\uparrow\downarrow), \; -1(\uparrow\downarrow, \uparrow\uparrow) \\ \;\;\;\; 0(\uparrow\downarrow, \uparrow\uparrow), \; -1(\uparrow\downarrow, \uparrow\uparrow), \; -2(\uparrow\downarrow) \end{cases}$$

или

$$m_{12}=\begin{cases}-2(\uparrow\downarrow),\ -1(\uparrow\downarrow),\quad 0(\uparrow\downarrow),\quad 1(\uparrow\downarrow),\quad 2(\uparrow\downarrow) & \Rightarrow\ L=2\ \ (D)\\ \quad -1(\uparrow\downarrow,\uparrow\uparrow),\ 0(\uparrow\downarrow,\uparrow\uparrow),\ 1(\uparrow\downarrow,\uparrow\uparrow) & \Rightarrow\ L=1\ \ (P)\\ \qquad 0(\uparrow\downarrow) & \Rightarrow\ L=0\ \ (S)\end{cases}$$

Таким образом, возможными термами являются:

$$^1D_1,\ \ ^3P_2,\ \ ^3P_1,\ \ ^3P_0,\ \ ^1P_1,\ \ ^1S_0 \text{ или } ^1D,\ \ ^3P,\ \ ^1P,\ \ ^1S\,.$$

Основному состоянию соответствует терм $^3P_0$.

6.1.3. Задания для самостоятельной работы

6.1. Вычислить обменную энергию атома гелия при условии, что электроны находятся в состояниях 1*s* и 2*s*.

Ответ: $A=0,08\dfrac{Ze_0^2}{4pe_0a}\approx 2{,}17$ *эВ.*

6.2. Найти число электронов в атомах, у которых в нормальном состоянии заполнены а) *K*-, *L*-оболочки, 3*s*- 3*p*-подоболочки; б) *K*- , *L*-, *M*- оболочки и подоболочки 4*s*, 4*p*, 4*d*, 5*s*.

Ответ: а) N_e = 18 – *атом аргона; б)* N_e = 48 – *атом кадмия.*

6.3. Записать электронную конфигурации атомов элементов аргона (Z = 18), криптона (Z = 36), палладия (Z = 46) и цезия (Z = 55).

6.4. Найти максимальное число электронов в атомах, имеющих следующие одинаковые квантовые числа: а) *n, l, m*; б) *n, l*; в) *n*.

Ответ: а) 2; *б)* $2(2l+1)$; *в)* $2m^2$.

6.5. Определить число электронов в заполненной *N*-оболочке, у которых одинаковые значения квантовых чисел: а) m=-1; б) m=1, m_s= ½.

Ответ: а) 6; *б)* 3.

6.6. Доказать, что все механические моменты (орбитальный, спиновый и полный) у заполненных электронных оболочек равны нулю.

6.7. Найти возможные состояния системы из трех эквивалентных электронов.

Ответ: $^4S,\ \ ^2D,\ \ ^2P$.

6.8. Показать, что в системе из 4-х эквивалентных p-электронов состояния те же, что и в системе из двух эквивалентных p-электронов, т.е. две «дырки» имеют те же состояния, что и два электрона.

6.9. Пользуясь правилами Хунда, определить основной терм для атомов, имеющих на незаполненной подоболочке три p-электрона.

Ответ: $^4S_{3/2}$.

6.10. С помощью правил Хунда определить основной терм атома, электронная конфигурация незаполненной подоболочки которого nd^3.

Ответ: $^4F_{3/2}$.

6.11. С помощью правил Хунда определить основной терм атома, электронная конфигурация незаполненной подоболочки которого nd^5.

Ответ: $^6S_{5/2}$

6.12. С помощью правил Хунда определить основной терм атома, электронная конфигурация незаполненной подоболочки которого nd^7.

Ответ: $^4F_{9/2}$.

6.13. Спиновый механический момент двухэлектронной системы определяется квантовым числом S = 1. Найти угол между спинами эдектронов.

Ответ: $a = arc\cos\dfrac{1}{3}$.

6.14. Один из атомов находится в F-состоянии, другой – в D- состоянии. При этом число возможных значений квантового числа J в каждом состоянии одинаково и равно пяти. Определить значения спиновых квантовых чисел этих состояний.

Ответ: F-состояние – S = 2, D-состояние – S не определено.

6.15. Указать все термы, у которых мультиплетности одинаковы и равны 5, а кратность вырождения равна 3.

Ответ: ^5F, ^5D, ^5P.

6.16. Система состоит из трех электронов: один в s-состоянии, другой – в p- и третий – в d- состоянии. Какие термы соответствуют данной конфигурации электронов? Тип связи – Рассел-Саундерса.

Ответ: Дублетные термы – $^2P_{1/2}, {}^2P_{,3/2}, {}^2D_{3/2}, {}^2D_{5/2}, {}^2F_{5/2}, {}^2F_{7/2}$, *квартетные –* $^4P_{1/2}, {}^4P_{3/2}, {}^4P_{5/2}, {}^4D_{3/2}, {}^4D_{5/2}, {}^4D_{7/2}, {}^4F_{3/2}, {}^4F_{5/2}, {}^4F_{5/2}, {}^4F_{9/2}$.

6.17. Показать на примере двухэлектронной системы (l_1= 2, l_2 = 3), что оба типа связи (Рассел-Саундерса и *j-j* связь) дают одинаковые числа возможных состояний. Будет ли в чем-либо проявляться различие типов связи?

6.18. Определить возможные квантовые числа L, S и типы термов для атома, у которого заполнены все подоболочки, кроме; $4f^1 5d^1$.

Ответ: Синглетные и триплетные G-, F-, D- и P-состояния.

6.19. Определить основное состояние атома ванадия, имеющего следующую электронную конфигурацию: Ar: $3d^3 4s^2$.

Ответ: $^4F_{3/2}$.

6.20. Определить кратность вырождения основного состояния атома, электронная конфигурация которого Kr:$4d^6$.

Ответ: $^5D_4$; *кратность вырождения* – 9.

6.21. Определить возможные типы термов для электронных конфигураций из одного и пяти эквивалентных *p*-электронов.

Ответ: $^2P_{1/2}$, $^2P_{3/2}$ *– для обеих конфигураций.*

6.2. Атом в магнитном поле.

6.2.1. Краткие теоретические сведения

С полным механическим моментом атома связан его магнитный момент, обусловленный орбитальным и спиновым движением электронов и прецессирующий относительно линий индукции $\vec{B}$ с ларморовской частотой прецессии

$$\vec{\Omega} = -\frac{e_0}{2m_0}\vec{B}. \qquad (6.10)$$

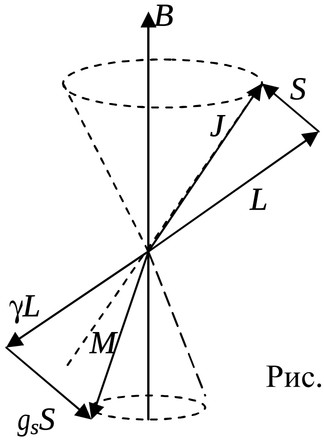


Рис.6.4

При этом проекция магнитного момента на направление поля (см. рис.6.4)

$$M_z = -(g L_z + g_s S_z) = -g\, g J_z, \qquad (6.11)$$

где коэффициент g называется фактором Ланде и равен

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}. \qquad (6.12)$$

Т.к. $J_z = m_J \hbar \quad (m_J = -J, (-J+1), ..., (J-1), J)$, то

$$M_z = -g\, g m_J \hbar = -m_Б g m_J \qquad (6.13)$$

и

$$\left|\vec{M}\right| = m_Б g\sqrt{J(J+1)}\,. \qquad (6.14)$$

Очевидно, что если полный спин атома равен нулю, то $J = L$; магнитный момент такого атома определяется только орбитальным движением электронов и в этом случае g=1.

С магнитным моментом связана дополнительная энергия, приобретаемая атомом во внешнем магнитном поле

$$\Delta E = -\left(\vec{M}\vec{B}\right) = m_Б B g m_J = g m_J \Omega \hbar\,, \qquad (6.15)$$

которую в слабом поле можно рассматривать как возмущение, снимающее вырождение по магнитному квантовому числу m_J. При этом к правилам отбора (6.7) добавляется условие

$$\Delta m_J = 0, \pm 1. \qquad (6.16)$$

Расщепление атомных термов в магнитном поле приводит к появлению спектральных линий с частотами, отстоящими от частоты перехода невозмущенного атома на величину

$$\Delta n = \Omega\left(g_J m_J - g_{J'} m_{J'}\right). \qquad (6.17)$$

Формулой (6.17) описывается так называемый «аномальный» эффект Зеемана. Если g = 1 (нормальный эффект Зеемана), то

$$\Delta n = \Omega \Delta m_J = 0, \pm\Omega\,, \qquad (6.18)$$

т.е. соответствующий терм расщепляется на три равноотстоящих подуровня.

6.2.2. Примеры решения задач

Задача 1. Построить схему возможных переходов между термами $^2P_{3/2}$ и $^2S_{1/2}$. Вычислить смещения зеемановских компонент в единицах ларморовской частоты W.

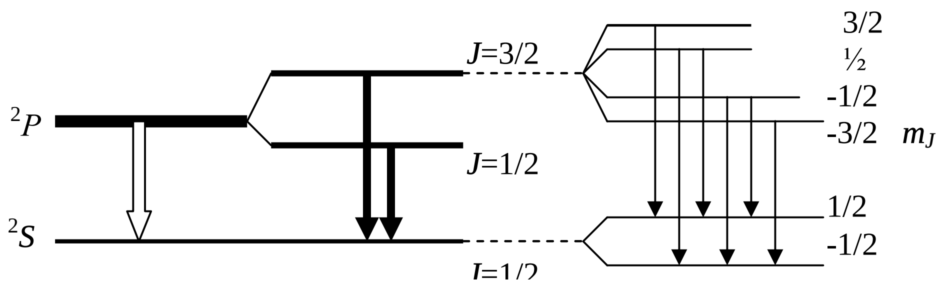
<u>Решение</u>

Для терма $^2P_{3/2}$ S = 1|2, L = 1 и J = 3/2, а для терма $^2S_{1/2}$ – L = 0, S = ½ и J=½. Схема возможных переходов в отсутствие магнитного поля с учетом правил отбора (6.7) представлена на рис. 1а). В соответствии с правилами отбора на рис.1б) представлена схема переходов $^2P_{3/2} \to {}^2S_{1/2}$ при расщеплении этих термов в магнитном поле.

Определим значения фактора Ланде для термов $^2P_{3/2}$ и $^2S_{1/2}$:

терм $^2P_{3/2}$ $\;-\; g_P = 1 + \dfrac{3/2(3/2+1) + 1/2(1/2+1) - 1(1+1)}{2\cdot 3/2(3/2+1)} = 1 + \dfrac{1}{3} = \dfrac{4}{3}$;

терм $^2S_{1/2}$ $\;-\; g_S = 1 + \dfrac{1/2(1/2+1) + 1/2(1/2+1) - 0}{2\cdot 1/2(1/2+1)} = 2$.



а) б)

Рис.1

Вычислим смещения зеемановских компонент расщепленных термов, указанных на рис.1б). Для рассматриваемых P-состояний имеем

$$1)\ m_J=\pm\frac{3}{2}:\quad \Delta E_{3/2}=\pm\frac{3}{2}g_P\hbar\Omega=\pm\frac{3}{2}\frac{4}{3}\hbar\Omega=\pm2\hbar\Omega;$$

$$2)\ m_J=\pm\frac{1}{2}:\quad \Delta E_{1/2}=\pm\frac{1}{2}g_P\hbar\Omega=\pm\frac{1}{2}\frac{4}{3}\hbar\Omega=\pm\frac{2}{3}\hbar\Omega.$$

Для S-состояний $\Delta E_{1/2}=\pm\frac{1}{2}g_S\Omega\hbar=\pm\hbar\Omega$.

Вычислим смещения спектральных линий зеемановских компонент для переходов, указанных на рис.1б).

Переход $^2P_{3/2}\rightarrow{}^2S_{1/2}\quad(m_J=3/2\rightarrow m_J=1/2)$:

$$\Delta n_1=\Omega\left(\frac{3}{2}g_P-\frac{1}{2}g_S\right)=\Omega.$$

Переход $^2P_{3/2}\rightarrow{}^2S_{1/2}\quad(m_J=1/2\rightarrow m_J=1/2)$:

$$\Delta n_2=\Omega\frac{1}{2}\left(\frac{4}{3}-2\right)=-\frac{1}{3}\Omega.$$

Переход $^2P_{3/2}\rightarrow{}^2S_{1/2}\quad(m_J=1/2\rightarrow m_J=-1/2)$:

$$\Delta n_3=\Omega\frac{1}{2}\left(\frac{4}{3}+2\right)=\frac{5}{3}\Omega.$$

Переход $^2P_{3/2}\rightarrow{}^2S_{1/2}\quad(m_J=-1/2\rightarrow m_J=1/2)$:

$$\Delta n_4=-\Omega\frac{1}{2}\left(\frac{4}{3}+2\right)=-\frac{5}{3}\Omega.$$

Переход $^2P_{3/2}\rightarrow{}^2S_{1/2}\quad(m_J=-1/2\rightarrow m_J=-1/2)$:

$$\Delta n_5=-\Omega\frac{1}{2}\left(\frac{4}{3}-2\right)=\frac{1}{3}\Omega.$$

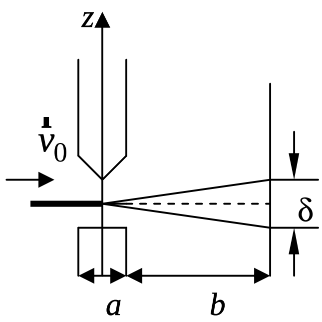
Переход $^2P_{3/2}\rightarrow{}^2S_{1/2}\quad(m_J=-3/2\rightarrow m_J=-1/2)$:

$$\Delta n_6=-\Omega\left(\frac{3}{2}g_P-\frac{1}{2}g_S\right)=-\Omega.$$

Из полученных расчетов видно, что

$$\Delta n_1 = -\Delta n_6, \quad \Delta n_2 = -\Delta n_5, \quad \Delta n_3 = -\Delta n_4 \ .$$

6.2.3. Задания для самостоятельной работы



6.22. Какова скорость атомов серебра (находящихся в нормальном состоянии) в опытах Штерна-Герлаха, с которой они входят в область сильно неоднородного поперечного магнитного поля, если градиент напряженности магнитного поля $\frac{dH}{dz} = 4 \cdot 10^7$ А/м², a= 15 см, b = 25 см, величина расщепления δ = 3 мм?

Ответ: $v_0 = \sqrt{\dfrac{m_0 \dfrac{dH}{dz} a(a+2b) m_Б}{m_0 b}} \approx 2{,}9 \cdot 10^2 \, м/с.$

6.23. Найти величину расщепления в опыте Штерна-Герлаха (см. рис. к задаче 6.22) для атомов в основном состоянии $^2S_{1/2}$, если $\frac{dH}{dz} = 2 \cdot 10^7$ А/м², a=15 см, b = 25 см, а начальная кинетическая энергия атомов E = 0,1 эВ.

Ответ: $d = m_0 \dfrac{dH}{dz} \dfrac{a(a+2b)}{2E} m_Б.$

6.24. Вычислить фактор Ланде для атомов с одним валентным электроном в состояниях S, P, D, F.

Ответ: S-состояние – g = 2; P-состояния – g_1= 2/3, g_2= 4/3; D-состояния – g_1=4/5, g_2= 6/5; F-состояния – g_1=6/7 g_2=8/7.

6.25. Вычислить магнитный момент атома водорода в основном состоянии.

Ответ: $|\vec{M}| = m_Б \sqrt{3}.$

6.26. Построить схему возможных переходов в магнитном поле между состояниями $^1D \to {}^1P$. Сколько компонент содержит спектральная линия, соответствующая этим переходам?

Ответ: Три компоненты.

6.27. Интервал между крайними компонентами спектральной линии при нормальном эффекте Зеемана $\Delta l = 0{,}035$ нм. Определить индукцию магнитного поля, если длина волны несмещенной линии $l = 612$ нм.

Ответ: $B = \dfrac{c \Delta l}{2 e_0 l^2} = 0{,}08 \, Тл.$

6.28. Интервал между соседними подуровнями термов при нормальном эффекте Зеемана $\Delta E = 4{,}5\cdot 10^{-5}$ эВ. Найти длину волны спектральной линии, если интервал длин волн между ее крайними компонентами $\Delta l = 0{,}02$ нм.

Ответ: $l = \sqrt{\dfrac{c\mathbf{h}\Delta l}{2\Delta E}} = 525\,\text{нм}.$

6.29. Какова должна быть разрешающая способность $\dfrac{l}{dl}$ спектрального прибора, позволяющего разрешить зееменовскую структуру спектральной линии λ = 600 нм при переходах между состояниями $^2P_{3/2} \to {}^2S_{1/2}$, если напряженность магнитного поля H = 6·10^5 А/м.

Ответ: $\dfrac{l}{dl} = \dfrac{3m_0 c}{2m_0 He_0 l} = 2{,}12\cdot 10^4.$

6.30. Определить возможные значения магнитного момента атома в состоянии ^3D.

Ответ: $M_3 = \dfrac{8}{\sqrt{3}}m_Б,\quad M_2 = \dfrac{7}{\sqrt{6}}m_Б,\quad M_1 = \dfrac{1}{\sqrt{2}}m_Б.$

6.31. Определить магнитный момент и его возможные проекции для атома в состоянии ^1D.

Ответ: $M = \sqrt{6}m_Б;\quad M_z = 0, \pm m_Б, \pm 2m_Б.$

6.32. Атом находится на оси кругового витка с током I = 20 А на расстоянии z = 10 см от центра витка. Радиус витка R = 10 см. Вычислить максимальное значение силы взаимодействия между током и атомом в состояниях а) $^2P_{3/2}$; б) $^4D_{1/2}$.

Ответ: $F_{\max} = \dfrac{3m_0 IR^2 z}{(R^2+z^2)}m_Б \approx 6\cdot 10^{-27}\,H.$

6.33. Узкий пучок атомов пропускают по методу Штерна-Герлаха через сильно неоднородное магнитное поле. На сколько компонент расщепится пучок атомов, находящихся в состояниях а) ^6S; б) $^5F_1$?

Ответ: а) 6*; б)* 3.

6.34. Атом находится в магнитном поле индукцией B = 0,6 Тл. Определить спектральный символ синглетного терма, если общая ширина расщепления составляет 1,6 см$^{-1}$.

Ответ: $L = \dfrac{\Delta\mathbf{h}c}{2m_Б B} = 4$ *(терм* ^1G*).*

6.35. Какой эффект Зеемана обнаруживается в слабом магнитном поле, если спектральные линии обусловлены переходами: а) $^1D \to ^1P$; б) $^3D_1 \to ^3P_0$; в) $^2D_{3/2} \to ^2P_{1/2}$?

Ответ: а), б) – нормальный; в) аномальный.

6.36. Узкий пучок атомов пропускают по методу Штерна-Герлаха через резко неоднородное магнитное поле. Определить а) максимальные значения проекции магнитных моментов атомов в состояниях ^4F, ^6S и ^5D, если известно, что пучок расщепился соответственно на 4, 6 и 9 компонент; б) на сколько компонент расщепляется пучок атомов, находящихся в состояниях $^3D_2$, $^5F_1$.

Ответ: а) $^4F_{3/2}:\ M_z = (3/5)m_Б$; $^6S:\ M_z = 5m_Б$; $^5\mathrm{D}_4:\ M_z = 6m_Б$;
б) 5 *и* 3 *соответственно.*

6.37. В одном из опытов по расщеплению узкого атомарного пучка по методу Штерна-Герлаха использовали атомы ванадия в состоянии $^4F_{3/2}$. Найти расстояние между крайними компонентами пучка на экране (см. рис. к зад. 6.22), если a = 3 см и b = 10 см. Скорость атомов в пучке на входе в поле v = 400 м/с. Величина $\frac{\partial H}{\partial z} = 8\cdot 10^6$ А/м^2.

Ответ: $d = \frac{m_0 gJa(a+2b)}{m_0 v^2}\frac{\partial H}{\partial z} m_Б \approx 2{,}8\,мм.$

6.38. Вычислить смещения (в единицах $(m_Б B)/\hbar$) в слабом магнитном поле зеемановских компонент спектральной линии: а) $^3D_3 \to {}^3P_2$; б) $^3D_2 \to ^3P_2$.

Ответ: а) $\Delta = \left(0, \pm\frac{1}{6}, \pm\frac{1}{3}, \pm\frac{5}{6}, \pm 1, \pm\frac{7}{6}, \pm\frac{4}{3}, \pm\frac{3}{2}\right)\frac{m_Б B}{\hbar}$;

б) $\Delta = \left(0, \pm\frac{1}{3}, \pm\frac{2}{3}, \pm\frac{5}{6}, \pm\frac{7}{6}, \pm\frac{3}{2}, \pm\frac{11}{6}\right)\frac{m_Б B}{\hbar}$.

6.39. Максимальное значение проекции магнитного момента атома, находящегося в состоянии D_2, равно четырем магнетонам Бора. Определить мультиплетность этого терма.

Ответ: $(2S+1) = 7$.

6.40. Найти полный механический момент атомов в состояниях ^4D и ^5F, если известно, что в этих состояниях магнитный момент равен нулю.

Ответ: $|\vec{J}| = \hbar\frac{\sqrt{3}}{2}$ *и* $\hbar\sqrt{2}$ *соответственно.*

6.41. С помощью правил Хунда вычислить магнитный момент основного состояния атома, в котором незаполненная подоболочка имеет электронную конфигурацию а) np^5; б) nd^5.

Ответ: а) $\frac{2\sqrt{15}}{3} m_Б$ *– терм* $^2P_{3/2}$; *б)* $\sqrt{35} m_Б$ *– терм* ^6S.

6.42. Найти угловые скорости прецессии полного механического момента атома в магнитном поле $H = 8 \cdot 10^4$ А/м, если атом находится а) в состоянии ^1P; б) $^2S_{1/2}$; в) $^2P_{3/2}$.

Ответ:а) $8{,}8 \cdot 10^8$ c^{-1}; *б)* $1{,}76 \cdot 10^9$ c^{-1}; *в)* $1{,}17 \cdot 10^9$ c^{-1}.

6.43. Найти угловые скорости прецессии полного механического момента атома в магнитном поле $H = 8 \cdot 10^4$ А/м, если атом находится а) в основном состоянии, электронная конфигурация незаполненной подоболочки которого np^4.

Ответ: Состояние $^3P_2$: $\Omega = g\, g m_0 H = 1{,}6 \cdot 10^9$ c^{-1}.

6.44. Механический момент атома в состоянии ^5F прецессирует в магнитном поле Н = $4 \cdot 10^4$ А/м с угловой скоростью $\omega = 5{,}5 \cdot 10^9$ рад/с. Определить механический и магнитный моменты атома.

Ответ: $\left|\vec{J}\right| = \hbar\sqrt{6}$.

ТАБЛИЦА ВАРИАНТОВ ИНДИВИДУАЛЬНЫХ ЗАДАНИЙ

Вари-ант	**Модуль 1** (номера заданий)						**Модуль 2** (номера заданий)				
	Раздел 1				**Раздел 2**		**Раз. 3**	**Раз. 4**	**Раз. 5***	**Раздел 6**	
1	1.11	1.16	1.44	1.59	2.2	2.11а	3.1	4.5	5.5	6.16	6.23
2	1.7	1.20	1.45	1.60	2.3	2.12а	3.2	4.6	5.4	6.17	6.24
3	1.12	1.21	1.46	1.61	2.4	2.13	3.3	4.7	6.3	6.18	6.25
4	1.13	1.22	1.47	1.62	2.1	2.14а	3.4	4.8	5.2	6.19	6.26
5	1.1	1.23	1.49	1.63	2.5	2.15	3.5	4.9	5.1	6.21	6.27
6	1.2	1.24	1.50	1.64	2.6а	2.16	3.6	4.10	5.13	6.2	6.33
7	1.3	1.25	1.51	1.65	2.6б	2.17	3.7	4.11	5.12	6.3	6.29
8	1.4	1.26	1.52	1.66	2.7а	2.18	3.8	4.12	5.1	6.4	6.30
9	1.5	1.27	1.53	1.67	2.7б	2.19	3.9	4.13	5.2	6.6	6.31
10	1.6	1.28	1.54	1.68	2.8а	2.20	3.10	4.14	5.3	6.7	6.32
11	1.7	1.29	1.55	1.69	2.8б	2.21	3.11	4.15	5.4	6.8	6.43
12	1.8	1.30	1.37	1.70	2.9	2.22	3.12	4.16	5.5	6.9	6.36
13	1.9	1.31	1.38	1.71	2.10а	2.11б	3.13	4.8	5.6	6.11	6.37
14	1.10	1.32	1.39	1.72	2.10б	2.12б	3.14	4.9	5.7	6.12	6.39
15	1.12	1.33	1.40	1.73	2.10в	2.13	3.5	4.1	5.8	6.13	6.40
16	1.13	1.34	1.41	1.74	2.7а	2.11в	3.6	4.2	5.9	6.14	6.38
17	1.15	1.35	1.42	1.75	2.8а	2.14б	3.7	4.3	5.10	6.11	6.42
18	1.6	1.22	1.43	1.56	2.10а	2.22	3.8	4.4	5.11	6.10	6.43

Задания раздела, помеченного звездочкой, не являются обязательными для выполнения всеми студентами. Выполнение этих заданий соответствует углубленному изучению квантовой механики и высоким баллам оценивания.

ПРИЛОЖЕНИЯ

Приложение А. Работа выхода электронов из металла

Металл	***A*, эВ**	**Металл**	***A*, эВ**	**Металл**	***A*, эВ**
Алюминий	3,74	Калий	2,15	Никель	4,84
Барий	2,29	Кобальт	4,25	Платина	5,29
Висмут	4,62	Литий	2,39	Серебро	4,28
Вольфрам	4,50	Медь	4,47	Титан	3,92
Железо	4,36	Молибден	4,27	Цезий	1,89
Золото	4,58	Натрий	2,27	Цинк	3,74

Приложение Б. Дельта-функция и ее свойства

δ-функция Дирака δ(x - x_0) равна 0 при $x \neq x_0$ и неограниченно возрастает при $x = x_0$. δ-функцию можно представить в виде некоторого предела несколькими способами, наиболее употребительным из которых является представление Фурье:

$$d(x_0) = \lim_{a \to \infty} \int_{-a}^{a} e^{2p\,i(x_0 - x)} dx .$$

Некоторые специальные свойства δ-функции:

1) $d(x) = d(-x) = d^*(x)$, $d(ax) = \dfrac{1}{a} d(x)$;

2) $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} f(x) d(x_0 - x) dx = f(x_0)$; $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} d(x_0 - xx) dx = 1$;

3) $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} d(t - x) d(s - x) dx = d(t - s)$;

4) $\displaystyle d'(x) = -\frac{1}{x} d(x) = -d'(-x) = -\frac{1}{2p\,i} \int_{-\infty}^{\infty} t e^{itx} dt$.

Приложение В. Дифференциальные операторы в цилиндрических и сферических координатах

В случаях осе-симметричного или центрально-симметричного полей возникает необходимость перехода соответственно к цилиндрическим или сферическим координатам.

Цилиндрические координаты

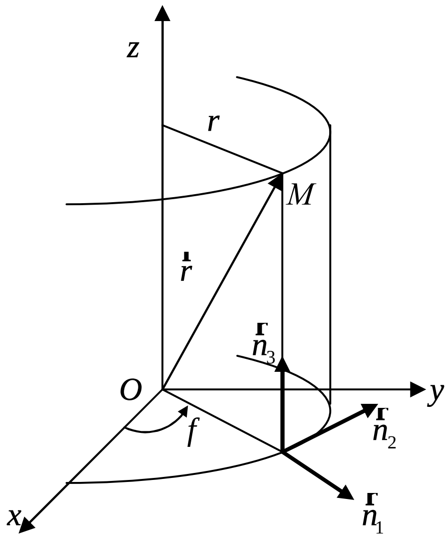


Рис.П.3.1

Положение точки M с декартовыми координатами x,y,z в цилиндрических координатах описывается тремя независимыми величинами– расстоянием от оси симметрии r $(r \geq 0)$, углом между осью Ox и проекцией радиус-вектора на плоскость xOy φ $(0 \leq j \leq 2p)$ и координатой z (рис. П.3.1). При этом

$$x = r\cos f, \quad y = r\sin f, \quad z = z.$$

С координатами r, j, z связана правая тройка единичных ортогональных векторов $\vec{n}_1 = \vec{n}_r$, $\vec{n}_2 = \vec{n}_j$ и $\vec{n}_3 = \vec{n}_z$.

Элементы длины, площади и объема в цилиндрических координатах имеют вид:

$$dl_1 = dr, \qquad dl_2 = rdf, \qquad dl_3 = dz,$$

$$dS_1 = rdfdz, \quad dS_2 = dzdr, \quad dS_3 = rdrdf,$$

$$dV = rdrdfdz.$$

Операторы теории поля записываются в цилиндрических координатах следующим образом:

$$grad\, j = \vec{n}_r \frac{\partial j}{\partial r} + \vec{n}_f \frac{1}{r}\frac{\partial j}{\partial f} + \vec{n}_z \frac{\partial j}{\partial z};$$

$$div\vec{A} = \frac{1}{r}\frac{\partial (rA_r)}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial A_f}{\partial f} + \frac{\partial A_z}{\partial z};$$

$$rot\vec{A} = \vec{n}_r\left(\frac{1}{r}\frac{\partial A_z}{\partial f} - \frac{\partial A_f}{\partial z}\right) + \vec{n}_f\left(\frac{\partial A_r}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial r}\right) + \vec{n}_z\left(\frac{1}{r}\frac{\partial (rA_f)}{\partial r} - \frac{1}{r}\frac{\partial A_r}{\partial f}\right).$$

Оператор Лапласа в цилиндрических координатах имеет вид:

$$\Delta = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial f^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2},$$

или

$$\Delta=\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial f^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

Сферические координаты

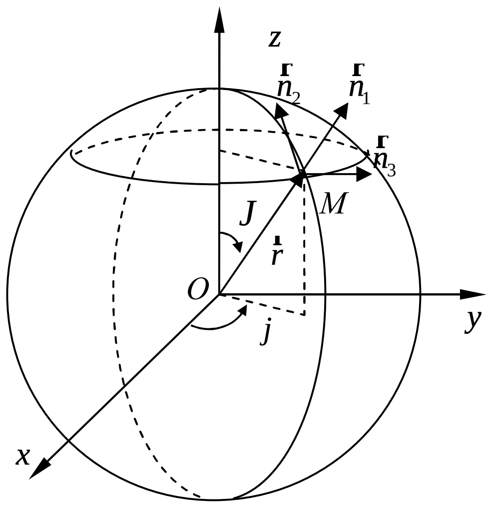


Рис.П.3.2

В сферических координатах (рис. П.3.2) положение точки M в пространстве определяется тремя величинами r, J и φ, где $r>0$ – расстояние от начала координат до точки, $0\le J\le p$ – угол между осью Oz и радиус-вектором $\vec{r}$ точки, $0\le j\le 2p$ – угол между осью Ox и проекцией радиус-вектора точки $\vec{r}$ на плоскость xOy.

Декартовы и сферические координаты связаны между собой соотношениями

$$x=r\sin J\cos j,\quad y=r\sin J\sin j,\quad z=r\cos J.$$

С координатами r, J и j связана правая тройка единичных ортогональных векторов

$$\vec{n}_1=\vec{n}_r,\quad \vec{n}_2=\vec{n}_q,\quad \vec{n}_3=\vec{n}_f.$$

Элементы длины, площади и объема в сферических координатах имеют следующий вид:

$$dl_1=dr,\qquad dl_2=rdJ,\qquad dl_3=r\sin J\,dj$$

$$dS_1=r^2\sin J\,dJ\,dj,\quad dS_2=r\sin J\,drdj,\quad dS_3=rdrdJ,$$

$$dV=r^2\sin J\,drdJ\,dj.$$

Дифференциальные операторы теории поля в сферических координатах имеют вид:

$$grad y=\vec{n}_r\frac{\partial y}{\partial r}+\vec{n}_q\frac{1}{r}\frac{\partial y}{\partial J}+\vec{n}_f\frac{1}{r\sin J}\frac{\partial y}{\partial j},$$

$$div\vec{A}=\frac{1}{r^2}\frac{\partial(r^2A_r)}{\partial r}+\frac{1}{r\sin J}\frac{\partial(\sin J A_q)}{\partial J}+\frac{1}{r\sin J}\frac{\partial A_f}{\partial j},$$

$$rot\vec{A}=\vec{n}_r\frac{1}{r\sin J}\left(\frac{\partial(\sin J A_f)}{\partial J}-\frac{\partial A_q}{\partial j}\right)+\vec{n}_q\left(\frac{1}{r\sin J}\frac{\partial A_r}{\partial j}-\frac{1}{r}\frac{\partial(rA_f)}{\partial r}\right)+$$

$$+\vec{n}_f\frac{1}{r}\left(\frac{\partial(rA_q)}{\partial r}-\frac{\partial A_r}{\partial J}\right).$$

$$\Delta=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin J}\frac{\partial}{\partial J}\left(\sin J\frac{\partial}{\partial J}\right)+\frac{1}{\sin^2 J}\frac{\partial^2}{\partial j^2}\right].$$

В некоторых случаях оператор Лапласа записывают так:

$$D = D_r + \frac{1}{r^2} D_{q,f} \,,$$

где

$$\Delta_r = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}$$ – его радиальная часть,

а

$$\Delta_{q,f} = \frac{1}{\sin J}\frac{\partial}{\partial J}\left(\sin J \frac{\partial}{\partial J} \right) + \frac{1}{\sin^2 J}\frac{\partial^2}{\partial j^2}$$ – угловая.

В центрально-симметричном поле, распределение которого не зависит от углов J и j, $\Delta = \Delta_r$, т.е. такое поле описывается одномерным оператором Лапласа D_r.

Приложение Г. Собственные значения и собственные функции операторов квадрата момента импульса и проекции момента импульса (уравнение и функции Лежандра в сферических координатах)

Нахождение собственных значений и собственных функций операторов квадрата момента импульса $\hat{L}^2$ и проекции момента импульса $\hat{L}_z$ сводится к решению уравнения

$$\frac{1}{\sin J}\frac{\partial}{\partial J}\left(\sin J\frac{\partial y}{\partial J}\right)+\frac{1}{\sin^2 J}\frac{\partial^2 y}{\partial j^2}=-\frac{L^2}{\mathbf{h}^2}y\ , \qquad (\text{П.4.1})$$

где J и j – угловые переменные в сферических координат.

Решение этого уравнения можно представить в виде произведения двух функций, каждая из которых зависит лишь от одной переменной:

$$y\,(J,j)=\Theta(J)\Phi(j)\,. \qquad (\text{П.4.2})$$

Умножим уравнение (П.4.1) на $\sin^2 J$; подставляя затем решение (П.4.2) в это уравнение и разделив его на произведение (П.4.2), получаем:

$$\frac{\sin J}{\Theta}\frac{d}{dJ}\left(\sin J\frac{d\Theta}{dJ}\right)+\sin^2 J\frac{L^2}{\mathbf{h}^2}=-\frac{d^2\Phi}{dj^2}=m^2, \qquad (\text{П4.3})$$

где m^2 – постоянная разделения. Тогда каждую из функций решения (П.4.2) можно найти, решив уравнения

$$\frac{\sin J}{\Theta}\frac{d}{dJ}\left(\sin J\frac{d\Theta}{dJ}\right)+\sin^2 J\frac{L^2}{\mathbf{h}^2}=m^2 \qquad (\text{П.4.4а})$$

и

$$-\frac{d^2\Phi}{dj^2}=m^2, \qquad (\text{П.4.4б})$$

Решением уравнения (П.4.4б) являются функции

$$\Phi_m(j)=e^{imj}\ , \qquad (\text{П.4.5})$$

причем $m=0,\pm 1,\pm 2,...$ – целые числа, что следует из требования периодичности $\Phi(j)=\Phi(j+2p)$.

Если уравнение (П.4.4а) переписать в виде

$$\frac{1}{\sin J}\frac{d}{dJ}\left(\sin J\frac{d\Theta}{dJ}\right)+\left(\frac{L^2}{\mathbf{h}^2}-\frac{m^2}{\sin^2 J}\right)\Theta=0 \qquad (\text{П.4.6})$$

и ввести новую переменную $\cos J=x$, то это уравнение преобразуется к уравнению Лежандра m-го порядка:

$$(1-x^2)y''-2xy'+\left(l-\frac{m^2}{1-x^2}\right)y=0\,,$$

решение которого возможно при значениях $l=l(l+1)$, причем $l=0,1,2,...$ и $|m|\le l$, т.е. $m=0,\pm 1,\pm 2,...,\pm l$. Это решение имеет вид присоединенных полиномов Лежандра, которые, в свою очередь, могут быть определены с помощью формулы Родриго в виде:

$$P_l^{(m)}(x)=(1-x^2)^{\frac{|m|}{2}}\frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}}P_l(x).$$

Здесь $P_l(x)$ – полиномы Лежандра, для которых формула Родриго имеет вид:

$$P_l(x)=\frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dx^l}(x^2-1)^l.$$

Таким образом, решением уравнения (П.4.6) являются присоединенные полиномы Лежандра

$$P_l^{(m)}(J)=(\sin J)^{|m|}\frac{d^{|m|}}{d(\cos J)^{|m|}}P_l(\cos J), \qquad (П.4.7)$$

где $P_l(\cos J)=\frac{(-1)^l}{2^l l!}\frac{d^l}{d(\cos J)^l}(1-\cos^2 J)^l$. (П.4.8)

Окончательно для собственных функций оператора квадрата момента импульса получаем выражение:

$$y(J,j)=Y_{lm}=P_l^{|m|}(\cos J)\cdot e^{imj}. \qquad (П.4.9)$$

Собственные функции Y_{lm} называются сферическими функциями.

Заметим, что $y_m(j)=Ce^{imj}$ являются собственными функциями оператора проекции момента импульса, а собственные значения операторов $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_z$ связаны с орбитальным квантовым числом l и магнитным квантовым числом m соотношениями

$$L^2=\mathbf{h}^2 l(l+1),\ L_z=m\mathbf{h},$$

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

Приложение Д. Уравнение Шредингера и его решение для квантового гармонического осциллятора

При движении одномерного осциллятора в поле $U(x)=\dfrac{mw^2x^2}{2}$ стационарное уравнение Шредингера имеет вид:

$$\frac{d^2y}{dx^2}+\frac{2m}{\mathbf{h}^2}\left(E-\frac{mw^2x^2}{2}\right)y=0. \qquad \text{(П.5.1)}$$

Введение безразмерной переменной $x=\sqrt{\dfrac{mw}{\mathbf{h}}}x$ и безразмерной энергии $l=\dfrac{2E}{\mathbf{h}w}$ позволяет записать уравнение (П.5.1) как

$$y''+ly-x^2y=0. \qquad \text{(П.5.2)}$$

При $x\to\infty$ слагаемым ly в этом уравнении можно пренебречь. Тогда уравнение Шредингера в безразмерных переменных приводится к асимптотическому уравнению

$$y''-x^2y=0. \qquad \text{(П.5.3)}$$

Решением уравнения (П.5.3) является $y_{асимп.}=e^{-x^2/2}$. Тогда решение уравнения П.5.2 можно быть представить произведением

$$y(x)=y_{асимп.}=e^{-x^2/2}\cdot u(x).$$

Подстановка этого решения в уравнение (П.5.2) приводит к уравнению для функции $u(x)$ вида:

$$u''-2xu+lu=0. \qquad \text{(П.5.4)}$$

Уравнение (П.5.4) имеет решение при $l=2n+1,\quad n=0,1,2,\ldots$ Этими решениями являются полиномы Эрмита-Чебышева

$$H_n(x)=(-1)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2}.$$

Тогда

$$y_n(x)=Ce^{-x^2/2}H_n(x) \qquad \text{(П.5.5)}$$

и

$$E_n=\frac{\mathbf{h}w}{2}l=\mathbf{h}w\left(n+\frac{1}{2}\right). \qquad \text{(П.5.6)}$$

Приложение Е. Некоторые интегралы квантовой механики

В некоторых задачах квантовой механики приходится вычислять определенные интегралы вида

$$\int\limits_0^\infty x^{2n} e^{-a x^2} dx \text{ и } \int\limits_0^\infty x^{2n+1} e^{-a x^2} dx,$$

а также эти интегралы в бесконечных пределах.

Рассмотрим интеграл

$$I_0 = \int\limits_0^\infty e^{-a x^2} dx,$$

называемый интегралом Пуассона. Введем

$$I_0^2 = \int\limits_0^\infty e^{-a x^2} dx \int\limits_0^\infty e^{-a y^2} dy.$$

Переходя к полярным координатам, получаем

$$I_0^2 = \int\limits_0^{p/2} dj \int\limits_0^\infty e^{-a r^2} r dr = \frac{p}{4a}.$$

Тогда

$$I_0(a) = \int\limits_0^\infty e^{-a x^2} dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{p}{a}}. \qquad (\text{П.6.1})$$

В бесконечных пределах

$$I_0(a) = \int\limits_{-\infty}^\infty e^{-a x^2} dx = \sqrt{\frac{p}{a}}. \qquad (\text{П.6.2})$$

Интегралы вида $I_{2n}(a) = \int\limits_0^\infty x^{2n} e^{-a x^2} dx$ можно рассматривать как производные соответствующего порядка по параметру α от интеграла $I_0(a)$. Так,

$$I_2(a) = \int\limits_0^\infty x^2 e^{-a x^2} dx = -\frac{d}{da} I_0(a) = \frac{1}{4}\frac{\sqrt{p}}{a^{3/2}}, \qquad (\text{П.6.3})$$

$$I_4(a) = \int\limits_0^\infty x^4 e^{-a x^2} dx = -\frac{d}{da} I_2(a) = (-1)^2 \frac{d^2}{da^2} I_0(a) = \frac{3}{8}\frac{\sqrt{p}}{a^{5/2}}. \qquad (\text{П.6.4})$$

Тогда

$$I_{2n}(a) = \int\limits_0^\infty x^{2n} e^{-a x^2} dx = (-1)^n \frac{d^n}{da^n} I_0(a) = (-1)^n \frac{1\cdot 3\cdot 5\cdot \ldots \cdot (2n+1)\sqrt{p}}{2^{n+1} a^{n+1/2}}. \qquad (\text{П6.5})$$

Очевидно, что значения производных по параметру α от интеграла Пуассона в бесконечных пределах можно получить удвоением результатов (П.6.3 – П.6.5).

Рассмотрим интегралы с нечетными степенями переменной *x* в подынтегральном выражении

$$I_{2n+1}(a)=\int_0^{\infty} x^{2n+1}e^{-a x^2}dx\,.$$

Т.к. в этом случае подынтегральная функция нечетная, то интеграл в симметричных пределах равен нулю при любых *n*. Очевидно, что

$$I_1(a)=\int_0^{\infty} xe^{-a x^2}dx=\frac{1}{2a}\,. \qquad (\text{П}.6.6)$$

Выполняя дифференцирование (П.6.6) по параметру α, получаем:

$$I_3(a)=\int_0^{\infty} x^3e^{-a x^2}dx=-\frac{d}{da}I_1(a)=\frac{1}{2a^2}, \qquad (\text{П}.6.7)$$

$$I_5(a)=\int_0^{\infty} x^5e^{-a x^2}dx=-\frac{d}{da}I_3(a)=(-1)^2\frac{d^2}{da^2}I_1(a)=\frac{1}{a^3}, \qquad (\text{П}.6.8)$$

$$I_{2n+|1}(a)=\int_0^{\infty} x^{2n+1}e^{-a x^2}dx=(-1)^n\frac{d^n}{da^n}I_1(a)=\frac{(-1)^n n!}{2a^{n+1}}, \qquad (\text{П}.6.9)$$

Приложение Ж. Атом водорода. Некоторые сферические и радиальные функции

Таблица 1

состояние	***l*, *m***	$\boldsymbol{Y_{lm}(J, j)}$
s	0, 0	$Y_{00} = 1$
p	1, 0 1, ±1	$Y_{10} = \cos J$ $Y_{1,\pm 1} = \pm \sin J e^{\pm ij}$
d	2, 0 2, ±1 2. ±2	$Y_{20} = (3\cos^2 J - 1)$ $Y_{2,\pm 1} = \pm \sin J \cos J e^{\pm ij}$ $Y_{2,\pm 2} = \sin^2 J e^{\pm i2j}$
f	3, 0 3, ±1 3, ±2 3, ±3	$Y_{30} = (5\cos^2 J - 3\cos J)$ $Y_{3,\pm 1} = \pm \sin J (5\cos^2 J - 1) e^{\pm ij}$ $Y_{3,\pm 2} = \sin^2 J \cos J e^{\pm i2j}$ $Y_{3,\pm 3} = \pm \sin^3 J e^{\pm i3j}$

Таблица 2

состояние	***n*, *l***	$\boldsymbol{R_{nl}(\rho)}$**;** $\boldsymbol{\rho = r/a}$
1*s*	1, 0	$R_{10} = e^{-r}$
2*s*	2, 0	$R_{20} = (2 - r)e^{-r/2}$
2 *p*	2, 1	$R_{21} = r e^{-r/2}$
3*s*	3, 0	$R_{30} = (27 - 18r + 2r^2)e^{-r/3}$
3*p*	3, 1	$R_{31} = r(6 - r)e^{-r/3}$
3*d*	3, 2	$R_{32} = r^2 e^{-r/3}$

П р и м е ч а н и е: в табл.1 и 2 представлены ненормированные функции.

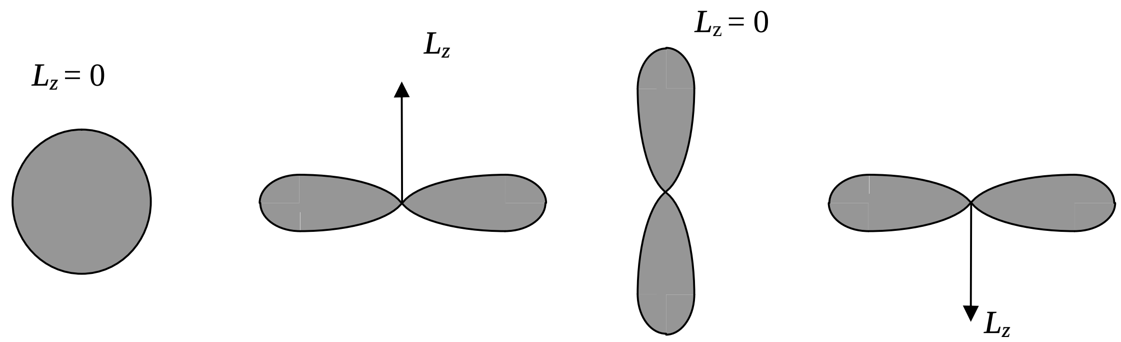
Угловое распределение электронной плотности в атоме водорода

$$\frac{dW(J,j)}{d\Omega}=\left|AY_{lm}\right|^2,\ d\Omega=\sin J\,dJ\,dj \ \text{ – элементарный телесный угол.}$$

Несколько первых нормированных угловых распределений электронной плотности:

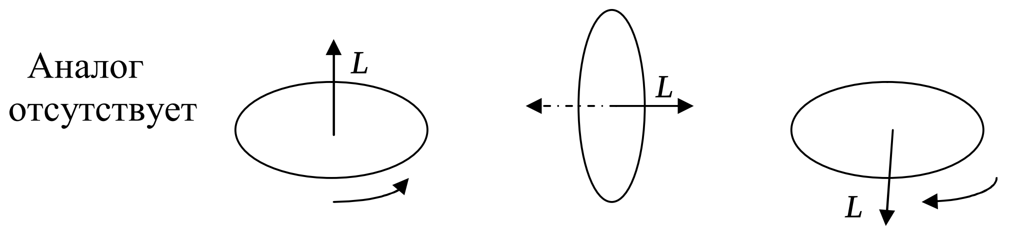
$$\left|AY_{00}\right|^2=\frac{1}{4p},\ \left|AY_{10}\right|^2=\frac{3}{4p}\cos^2 J,\ \left|AY_{1,\pm1}\right|^2=\frac{3}{8p}\sin^2 J.$$

Ниже графически представлены соответствующие распределения электронной плотности в полярных координатах (объемное изображение получается вращением фигур относительно оси симметрии Z).



Y_{00} — $l = 0$, $m = 0$, *s*-состояние; $Y_{1,1}$ — $l = 1$, $m = 1$; $Y_{1,0}$ — $l = 1$, $m = 0$; $Y_{1.-1}$ — $l = 1$, $m = -1$; *p* – с о с т о я н и я

К л а с с и ч е с к и е а н а л о г и



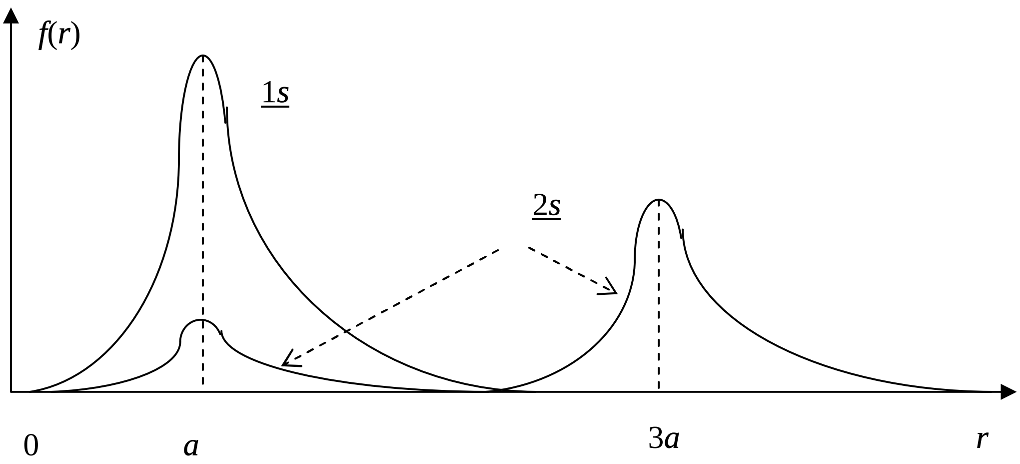
Радиальное распределение электронной плотности в атоме водорода

$dW(r)=f(r)dr$, где $f(r)=A^2R_{nl}^2r^2$ – функция распределения.

Так, для 1*s*- и 2*s*- состояний функции распределения равны:

$$f_{10}(r)=\frac{4r^2}{a^3}e^{-2r/a} \text{ и } f_{20}(r)=\frac{r2}{8a^3}(2-r/a)^2e^{-r/a}.$$

Эти распределения схематически представлены на рисунке:



Для ряда приложений полезно знать средние значения некоторых степеней ρ в стационарных состояниях *nl*. Ниже приводятся некоторые из них:

$$\overline{r} = \frac{1}{2}\left[3n^2 - l(l+1)\right],$$

$$\overline{r^2} = \frac{n^2}{2}\left[5n^2 + 1 - 3l(l-1)\right],$$

$$\overline{\left(\frac{1}{r}\right)} = \frac{1}{n^2},$$

$$\overline{\left(\frac{1}{r^2}\right)} == \frac{1}{n^3(l+1/2)},$$

$$\overline{\left(\frac{1}{r^3}\right)} = \frac{1}{n^3(l+1)(l+1/2)l}.$$

Среднее значение потенциальной энергии электрона равно удвоенному значению полной энергии

$$\overline{U} = \overline{\left(\frac{1}{r}\right)} E_a = -\frac{1}{n^2} E_a, \qquad E_a = \frac{e^2}{4pe_0 a}.$$

Приложение 3. Схема заполнения электронами состояний в атомах. Периодическая система элементов Д.И.Менделеева

Главное квантовое число n	Условное обозначение электронной оболочки	Условное обозначение электронной подоболочки	Квантовые числа			Максимальное число электронов	
			l	m	m_s	в подоболочке $2(2l+1)$	в оболочке $2n^2$
1	*K*	1*s*	0	0	±1/2	2	2
2	*L*	2*s*	0	0	±1/2	2	8
		2*p*	1	-1 0 +1	±1/2	6	
3	*M*	3*s*	0	0	±1/2	2	18
		3*p*	1	-1 0 +1	±1/2	6	
		3*d*	2	-2 -1 0 +1 +2	±1/2	10	
4	*N*	4*s*	0	0	±1/2	2	32
		4*p*	1	-1 0 +1	±1/2	6	
		4*d*	2 2	-2 -1 0 +1 +2 +	±1/2	10	
		4*f*	3 3	-3 -2 -1 0 +1 +2 +3	±1/2	14	

ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ЭЛЕМЕНТОВ Д.И. МЕНДЕЛЕЕВА

Период	Ряд	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	VIII	VIII
1	1	Водород Hydrogenium 0,089 **H** 1 $1s^1$ 3,75 ГЕК 1,731 14,0 1,00794(7) 110						(H)	Гелий Helium 0,179 **He** 2 $1s^2$ 3,57 ГЕК 1,633 ~1,0 (26 атм) 4,002602(2) $26^{\text{нт}}$		
2	2	Литий Lithium 0,53 **Li** 3 $[He]2s^1$ 3,49 ОЦК 453 6,941(2) 400	Бериллий Beryllium 1,85 **Be** 4 $[He]2s^2$ 2,29 ГЕК 1,567 1550 9,012182(3) 1000	Бор Borum 2,34 **B** 5 $[He]2s^22p^1$ 8,73 ТЕТ 0,576 2600 10,811(5) 1250	Углерод Carboneum 2,26 **C** 6 $[He]2s^22p^2$ 3,75 АЛМ (4300) 12,011(1) 1860	Азот Nitrogenium 1,03 **N** 7 $[He]2s^22p^3$ 4,039 ГЕК 1,651 63,3 14,00674(7) (β)$76^{\text{нт}}$	Кислород Oxygenium 1,43 **O** 8 $[He]2s^22p^4$ 6,83 КУБ 54,7 15,9994(3) (γ)$46^{\text{нт}}$	Фтор Fluorum 1,97(α) **F** 9 $[He]2s^22p^5$ МОН 53,5 18,9984032(9)	Неон Neonum 1,56 **Ne** 10 $[He]2s^22p^6$ 4,43 ГЦК 24,5 20,1797(6) 63		
3	3	Натрий Natrium 0,97 **Na** 11 $[Ne]3s^1$ 4,23 ОЦК 371,0 22,989768(8) 150	Магний Magnesium 1,74 **Mg** 12 $[Ne]3s^2$ 3,21 ГЕК 1,624 922 24,3050(6) 318	Алюминий Aluminium 2,70 **Al** 13 $[Ne]3s^23p^1$ 4,05 ГЦК 933 26,981539(5) $150^{\text{нт}}$	Кремний Silicium 2,33 **Si** 14 $[Ne]3s^23p^2$ 5,43 АЛМ 1683 28,0855(3) 394	Фосфор Phosphorus 1,82(бел.) **P** 15 $[Ne]3s^23p^3$ 7,17 КУБ 317,3 30,973762(4)	Сера Sulfur 2,07 **S** 16 $[Ne]3s^23p^4$ 10,47 РОМ 2,339 1,229 386 32,066(6)	Хлор Chlorum 2,09 **Cl** 17 $[Ne]3s^23p^5$ 6,24 РОМ 1,324 0,718 172,2 35,4527(9)	Аргон Argon 1,78 18 $[Ne]3s^23p^6$ 5,26 ГЦК 83,9 39,948(1) 85		
4	4	Калий Kalium 0,86 **K** 19 $[Ar]4s^1$ 5,23 ОЦК 337 39,0983(1) 100	Кальций Calcium 1,54 **Ca** 20 $[Ar]4s^2$ 5,58 ГЦК 1111 40,078(8) 230	Скандий Scandium 2,99 **Sc** 21 $[Ar]3d^14s^2$ 3,31 ГЕК 1,594 1812 44,955910(9) $359^{\text{нт}}$	Титан Titanium 4,51 **Ti** 22 $[Ar]3d^24s^2$ 2,95 ГЕК 1,588 1933 47,88(3) 380	Ванадий Vanadium 6,1 **V** 23 $[Ar]3d^34s^2$ 3,02 ОЦК 2163 50,9415(1) 390	Хром Cromium 7,19 **Cr** 24 $[Ar]3d^54s^1$ 2,88 ОЦК 2130 51,9961(6) 460	Марганец Manganum 7,43 **Mn** 25 $[Ar]3d^54s^2$ 8,89 КУБ 1518 54,93805(1) 400	Железо Ferrum 7,86 **Fe** 26 $[Ar]3d^64s^2$ 2,87 ОЦК 1808 55,847(3) 420	Кобальт Cobaltum 8,9 **Co** 27 $[Ar]3d^74s^2$ 2,51 ГЕК 1,622 1788 58,93320(1) 385	Никель Niccolum 8,9 **Ni** 28 $[Ar]3d^84s^2$ 3,52 ГЦК 1726 58,69(1) 375
4	5	Медь Cuprum 8,96 29 $[Ar]3d^{10}4s^1$ 3,61 ГЦК 1356 63,548(3) 315	Цинк Zincum 7,14 **Zn** 30 $[Ar]3d^{10}4s^2$ 2,66 ГЕК 1,856 693 65,39(2) 234	Галлий Gallium 5,91 **Ga** 31 $[Ar]3d^{10}4s^24p^1$ 4,51 РОМ 1,695 1,001 303 69,723(4) 240	Германий Germanium 5,32 **Ge** 32 $[Ar]3d^{10}4s^24p^2$ 5,66 АЛМ 1211 72,61(2) 360	Мышьяк Arsenicum 5,72 **As** 33 $[Ar]3d^{10}4s^24p^3$ 4,13 РМЭ 54°10´ 1090 74,92159(2) 285	Селен Selenium 4,79 **Se** 34 $[Ar]3d^{10}4s^24p^4$ 4,36 ГЕК 1,136 490 78,96(3) $150^{\text{нт}}$	Бром Bromum 4,10 **Br** 35 $[Ar]3d^{10}4s^24p^5$ 6,67 РОМ 1,307 0,672 266 79,904(1)	Криптон Kryptonum 3,07 **Kr** 36 $[Ar]3d^{10}4s^24p^6$ 5,72 ГЦК 116,5 83,80(1) $73^{\text{нт}}$		
5	6	Рубидий Rubidium 1,53 **Rb** 37 $[Kr]5s^1$ 5,59 ОЦК 312 85,4678(3) $56^{\text{нт}}$	Стронций Strontium 2,60 **Sr** 38 $[Kr]5s^2$ 6,08 ГЦК 1043 87,62(1) $147^{\text{нт}}$	Иттрий Yttrium 4,46 **Y** 39 $[Kr]4d^15s^2$ 3,65 ГЕК 1,571 1796 88,90585(2) $256^{\text{нт}}$	Цирконий Zirconium 6,49 **Zr** 40 $[Kr]4d^25s^2$ 3,23 ГЕК 1,593 2125 91,224(2) 250	Ниобий Niobium 8,4 **Nb** 41 $[Kr]4d^45s^1$ 3,30 ОЦК 2741 92,90638(2) 275	Молибден Molybdaenum 10,2 **Mo** 42 $[Kr]4d^55s^1$ 3,15 ОЦК 2890 95,94(1) 380	Технеций Technetium 11,5 **Tc** 43 $[Kr]4d^55s^2$ 2,74 ГЕК 1,604 2445 97,9072	Рутений Ruthenium 12,2 **Ru** 44 $[Kr]4d^75s^1$ 2,70 ГЕК 1,584 2583 101,07(2) $382^{\text{нт}}$	Родий Rhodium 12,4 **Rh** 45 $[Kr]4d^85s^1$ 3,80 ГЦК 2239 102,90550(3) нт	Палладий Palladium 12,0 **Pd** 46 $[Kr]4d^{10}5s^0$ 3,89 ГЦК 1825 106,42(1) 275
5	7	Серебро Argentum 10,5 **Ag** 47 $[Kr]4d^{10}5s^1$ 4,09 ГЦК 1234 107,8682(2) 215	Кадмий Cadmium 8,65 **Cd** 48 $[Kr]4d^{10}5s^2$ 2,98 ГЕК 1,886 594 112,411(8) 120	Индий Indium 7,31 **In** 49 $[Kr]4d^{10}5s^25p^1$ 4,59 ТЕТ 1,076 429,8 114,82(1) 129	Олово Stannum 7,30 **Sn** 50 $[Kr]4d^{10}5s^25p^2$ 5,82 ТЕТ 0,546 505 118,710(7) 170	Сурьма Stibium 6,62 **Sb** 51 $[Kr]4d^{10}5s^25p^3$ 4,51 РМЭ 57°6´ 904 121,75(3) 200	Теллур Tellurium 6,24 **Te** 52 $[Kr]4d^{10}5s^25p^4$ 4,45 ГЕК 1,330 723 127,60(3) $139^{\text{нт}}$	Йод Iodum 4,94 **I** 53 $[Kr]4d^{10}5s^25p^5$ 7,27 РОМ 1,347 0,659 387 126,90447(3)	Ксенон Xenonum 3,77 **Xe** 54 $[Kr]\ 4d^{10}5s^25p^6$ 6,20 ГЦК 161,3 131,29(1) $55^{\text{нт}}$		
6	8	Цезий Caesium 1,90 **Cs** 55 $[Xe]6s^1$ 6,05 ОЦК 302 132,90543(5) $40^{\text{нт}}$	Барий Baryum 3,5 **Ba** 56 $[Xe]6s^2$ 5,02 ОЦК 998 137,327(7) $110^{\text{нт}}$	Лантан Lanthanum 6,17 **La*** 57 $[Xe]5d^16s^2$ 3,75 ГЕК 1,619 1193 138,9055(2) 132	Гафний Hafnium 13,1 **Hf** 72 $[Xe]4f^{14}5d^26s^2$ 3,20 ГЕК 1,582 2495 178,49(2)	Тантал Tantalum 16,6 **Ta** 73 $[Xe]4f^{14}5d^36s^2$ 3,31 ОЦК 180,9479(1) 225	Вольфрам Wolframium 19,3 **W** 74 $[Xe]4f^{14}5d^46s^2$ 3,16 ОЦК 3683 183,85(3) 310	Рений Rhenium 21,0 **Re** 75 $[Xe]4f^{14}5d^56s^2$ 2,76 ГЕК 1,615 3453 186,207(1) $416^{\text{нт}}$	Осмий Osmium 22,6 **Os** 76 $[Xe]4f^{14}5d^66s^2$ 2,74 ГЕК 1,579 3318 190,2(1) $400^{\text{нт}}$	Иридий Iridium 22,5 **Ir** 77 $[Xe]4f^{14}5d^76s^2$ 3,84 ГЦК 2683 192,22(3) 430	Платина Platinum 21,4 **Pt** 78 $[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^0$ 2,92 ГЦК 2045 195,08(3) 230
6	9	Золото Aurum 19,3 **Au** 79 $[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^1$ 4,08 ГЦК 1337 196,96654(3) 170	Ртуть Hydrargyrum 13,6 **Hg** 80 $[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^2$ 2,99 РМЭ 70°45´ 234,3 200,59(3) 100	Таллий Thallium 11,85 **Tl** 81 $[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^26p^1$ 3,46 ГЕК 1,599 577 204,3833(2) 96	Свинец Plumbum 11,4 **Pb** 82 $[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^26p^2$ 4,95 ГЦК 601 207,2(1) 88	Висмут Bismuthum 9,8 **Bi** 83 $[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^26p^3$ 4,75 РМЭ 57°14´ 544,5 208,98037(3) 120	Полоний Polonium 9,4 **Po** 84 $[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^26p^4$ 3,35 ПК 527 208,9824	Астат Astatium **At** 85 $[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^26p^5$ (575) 209,9871	Радон Radonum 4,4 **Rn** 86 $[Xe]\ 4f^{14}5d^{10}6s^26p^6$ (ГЦК) (202) 222,0176		
7	10	Франций Francium **Fr** 87 $[Rn]7s^1$ (ОЦК) (300) 223,0197 $150^{\text{нт}}$	Радий Radium (5,0) **Ra** 88 $[Rn]7s^2$ 973 226,0254	Актиний Actinium 10,1 **Ac**** 89 $[Rn]6d^17s^2$ 5,31 ГЦК 1323 227,0278	Резерфордий Rutherfordium **Rf** 104 $[Rn]5f^{14}6d^27s^2$ 261,11	Дубний Dubnium **Db** 105 $[Rn]5f^{14}6d^37s^2$ 262,114	Сиборгий Seaborgium **Sg** 106 $[Rn]5f^{14}6d^47s^2$ 263,118	Борий Bohrium **Bh** 107 $[Rn]5f^{14}6d^57s^2$ 262,12	Хассий Hassium **Hs** 108 $[Rn]5f^{14}6d^67s^2$ [265]	Мейтнерий Meitnerium **Mt** 109 $[Rn]5f^{14}6d^77s^2$ [266]	Дармштадтий Darmstadtium **Ds** 110 $[Rn]5f^{14}6d^87s^2$ [271]

Русское наименование		Латинское наименование
Плотность	**Символ**	Атомный номер
Электронная конфигурация		
Постоянная решётки	Тип кристаллической структуры	Отношение c/a (b/a)
Температура плавления	Относительная атомная масса	Средняя температура Дебая

* Лантаноиды

Церий Cerium	Празеодим Praseodymium	Неодим Neodymium	Прометий Prometium	Самарий Samarium
6,77 **Ce** 58	6,77 **Pr** 59	7,00 **Nd** 60	**Pm** 61	7,54 **Sm** 62
$[Xe]4f^2 5d^0 6s^2$	$[Xe]4f^3 5d^0 6s^2$	$[Xe]4f^4 5d^0 6s^2$	$[Xe]4f^5 5d^0 6s^2$	$[Xe]4f^6 5d^0 6s^2$
5,16 ГЦК	3,67 ГЕК 1,614	3,66 ГЕК 1,614		9,00 РМЭ 23°13′
1071 140,115(4) $139^{\text{нт}}$	1204 140,90765(3) $152^{\text{нт}}$	1283 144,24(3) $157^{\text{нт}}$	(1350) 144,9127	1345 150,36(3) 166

Европий Europium	Гадолиний Gadolinium	Тербий Terbium	Диспрозий Dysprosium	Гольмий Holmium
7,90 **Eu** 63	8,23 **Gd** 64	8,54 **Tb** 65	8,78 **Dy** 66	9,05 **Ho** 67
$[Xe]4f^7 5d^0 6s^2$	$[Xe]4f^7 5d^1 6s^2$	$[Xe]4f^9 5d^0 6s^2$	$[Xe]4f^{10} 5d^0 6s^2$	$[Xe]4f^{11} 5d^0 6s^2$
4,61 ОЦК	3,64 ГЕК 1,588	3,60 ГЕК 1,581	3,59 ГЕК 1,573	3,58 ГЕК 1,570
1095 151,965(9) $107^{\text{нт}}$	1585 157,25(3) $176^{\text{нт}}$	1633 158,92534(3) $188^{\text{нт}}$	1680 162,50(3) $186^{\text{нт}}$	1743 164,93032(3) $191^{\text{нт}}$

Эрбий Erbium	Тулий Thulium	Иттербий Ytterbium	Люте	
9,37 **Er** 68	9,31 **Tu** 69	8,97 **Yb** 70	9,84	
$[Xe]4f^{12} 5d^0 6s^2$	$[Xe]4f^{13} 5d^0 6s^2$	$[Xe]4f^{14} 5d^0 6s^2$	[Xe]	
3,55 ГЕК 1,570	3,54 ГЕК 1,570	5,49 ГЦК	5,51	
1795 167,26(3) $195^{\text{нт}}$	1818 168,93421(3) $200^{\text{нт}}$	1097 173,04(3) $118^{\text{нт}}$	1929	

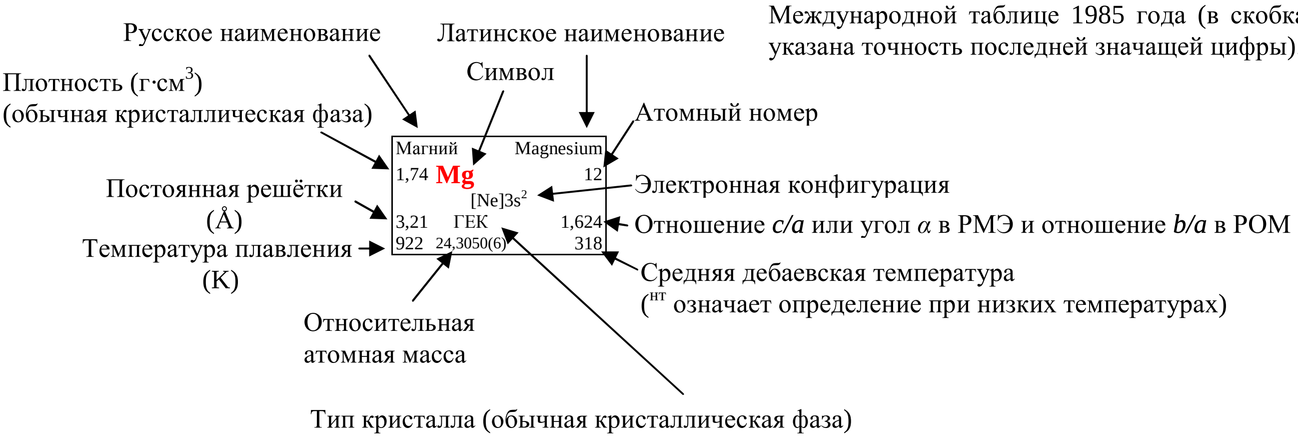
** Актиноиды

Торий Thorium	Протактиний Protactinium	Уран Uranium	Нептуний Neptunium	Плутоний Plutonium
11,7 **Th** 90	15,4 **Pa** 91	19,07 **U** 92	20,3 **Np** 93	19,8 **Pu** 94
$[Rn]6d^2 7s^2$	$[Rn]5f^2 6d^1 7s^2$	$[Rn]5f^3 6d^1 7s^2$	$[Rn]5f^5 6d^0 7s^2$	$[Rn]5f^6 6d^0 7s^2$
5,08 ГЦК	3,92 ТЕТ 0,825	2,85 РОМ 2,056 1,736	4,72 РОМ 1,411 1,035	МОН
2020 232,0381(1) 100	1470 231,03588(2)	1406 238,0289(1) $210^{\text{нт}}$	913 237,0482 $188^{\text{нт}}$	914 244,0642 $150^{\text{нт}}$

Америций Americium	Кюрий Curium	Берклий Berkelium	Калифорний Californium	Эйнштейний Einsteinium
11,8 **Am** 95	**Cm** 96	**Bk** 97	**Cf** 98	**Es** 99
$[Rn]5f^7 6d^0 7s^2$	$[Rn]5f^7 6d^1 7s^2$	$[Rn]5f^7 6d^2 7s^2$	$[Rn]5f^9 d^1 7s^2$	$[Rn]5f^{11} 6d^0 7s^2$
1446 243,0614	1631 247,0703	1323 247,0703	1173 242,0587	1133 252,083

Фермий Fermium	Менделевий Mendelevium	Нобелий Nobelium	Лоуренсий L	
Fm 100	**Md** 101	**No** 102	**Lr** 1	
$[Rn]5f^{12} 6d^0 7s^2$	$[Rn]5f^{13} 6d^0 7s^2$	$[Rn]5f^{14} 6d^0 7s^2$	$[Rn]5f^{14} 6d^1$	
257,0951	258,10	259,1009	260,105	

Относительные атомные массы приведены по Международной таблице 1985 года (в скобках указана точность последней значащей цифры).



ГЦК – гранецентрированный кубический
ОЦК – объёмоцентрированный кубический
ПК – простой кубический
КУБ – кубический
ТЕТ – тетрагональный

РОМ – ромбический
ГЕК – гексагональный
АЛМ – типа алмаза
РМЭ – ромбоэдрический
МОН – моноклинный

– s-элементы
– p-элементы
– d-элементы
– f-элементы

Приложение И. Основные физические постоянные

№	Наименование постоянной	Обозначение	Величина (СИ)
1	Скорость света	c	$2{,}998\cdot10^{8}$ м/с
2	Постоянная Планка	h $\mathbf{h}$	$6{,}626\cdot10^{-34}$ Дж·с $1{,}055\cdot10^{-34}$ Дж·с
3	Элементарный заряд	e_0	$1{,}602\cdot10^{-19}$ Кл
4	Масса покоя электрона	m_0	$9{,}11\cdot10^{-31}$ кг
5	электрическая постоянная	ε_0	$\dfrac{1}{4p\cdot3\cdot10^{9}}=8{,}85\cdot10^{-12}$ Ф/м
6	Магнитная постоянная	μ_0	$4\pi\cdot10^{-7}$ Гн/м
7	Постоянная Больцмана	k_B	$1{,}38\cdot10^{-23}$ Дж/К
8	Магнетон Бора	$\mu_Б$	$0{,}927\cdot10^{-23}$ Дж/Тл
9	Постоянная Ридберга	R' R	10973731 $см^{-1}$ $2{,}07\cdot10^{16}$ $с^{-1}$
10	Постоянная тонкой структуры	α	1/137
11	Постоянная Стефана-Больцмана	σ	$5{,}67\cdot10^{-8}$ $Вт/м^2$
12	Первый боровский радиус	a	$0{,}529\cdot10^{-10}$ м
13	Комптоновская длина волны	Λ	$0{,}024\cdot10^{-10}$ м
14	Удельный заряд электрона	e_0/m_0	$1{,}7585\cdot10^{14}$ Кл/кг
15	Масса покоя протона	m_p	$1{,}6726\cdot10^{-27}$ кг
16	Масса покоя нейтрона	m_n	$1{,}6749\cdot10^{-27}$ кг
17	Ядерный магнетон	$m_я$	$5{,}0507\cdot10^{-27}$ Дж/Тл

СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Блохинцев Д. И.** Основы квантовой механики / Д. И. Блохинцев. – М. : Наука, 1983.

2. **Давыдов А. С.** Квантовая механика / А. С. Давыдов. – М. : Наука, 1973.

3. **Соколов А. А.** Квантовая механика / А. А. Соколов, И. М Тернов, В. И. Жуковский. – М. : Наука, 1973.

4. **Матвеев А. Н.** Квантовая механика и строение атома / А.Н Матвеев. – М. : Высшая школа, 1965.

5. **Мултановский В. В.** Курс теоретической физики. Квантовая механика / В. В. Мултановский, А. С. Василевский. – М. : Просвещение, 1991. – 320 с.

6. **Федорченко А. М.** Основы квантовой механики / А. М. Федорченко. – К. : Вища школа, 1979.

7. **Ландау Л. Д.** Квантовая механика. Нерелятивистская теория / Л. Д. Ландау, Е. М Лифшиц. – М. : Наука, 1989.

8. **Ахиезер А. И.** Атомная физика / А. И. Ахиезер. – К. : Наукава думка, 1988.

9. **Нерсесов Э. А.** Основные законы атомной и ядерной физики / Э. А. Нерсесов. – М. : Высшая школа, 1988.

10. **Шпольский Э. В.** Атомная физика / Э. В. Шпольский. – М. : Наука, 1974.

11. **Вакарчук І. О.** Квантова механіка / І. О. Вакарчук. – Львів : Вид-во ЛНУ, 2004.

12. **Бережной Ю. А.** ЛекціЮ квантовоЮмеханіки / Ю. А. Бережной / – К. : Майстер-клас, 2008.

13. **Гречко Л. Г.** Сборник задач по теоретической физике / Л. Г. Гречко, В. И Сугаков, О. Ф Томасевич, А. М. Федорченко. – М. : Высшая школа, 1972.

14. **Иродов К. И.** Сборник задач по атомной и ядерной физике / К. И. Иродов. – М. : Наука, 1966.

15. **Серова Ф. Г.** Задачник-практикум по теоретической физике. Квантовая механика / К. И. Иродов. – М. : Просвещение, 1982. – 120 с.

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

С

Т

У

Ф

Э

ИМЕННОЙ УКАЗАТЕЛЬ

Навчальне видання

КАРА-МУРЗА Світлана Вітольдівна
ГОРБЕНКО Євген Євгенович
ГРИЦЬКИХ Володимир Олексійович
ЖИХАРЄВ Ігор Васильович

КВАНТОВА МЕХАНІКА

Навчальний посібник
для самостійної роботи студентів
IV курсу спеціальності 6.040203 «Фізика»

Російською мовою

У посібнику викладено основні теоретичні відомості та різні типові задачі за розділами лекційного курсу. У кожному розділі детально розглянуто приклади розв'язання задач, а також наведено задачі для самостійної роботи (з відповідями) за всіма основними розділами курсу „Квантова механіка".

Призначений для студентів спеціальності 6.040203 „Фізика", студентів фізичних спеціальностей, а також буде корисним для викладачів вищих навчальних закладів, коледжів, ліцеїв, гімназій, шкільних вчителів.

Редактор – Кара-Мурза С. В.
Комп'ютерний макет – Горбенко Є. Є.

Здано до склад. 16.05.2011 р. Підп. до друку 15.06.2011 р.
Формат 60х84 1/16. Папір офсет. Гарнітура Times New Roman.
Друк ризографічний. Ум. друк. арк. 7,50. Наклад 200 прим. Зам. № 137.

Видавець і виготовлювач
Видавництво Державного закладу
„Луганський національний університет імені Тараса Шевченка"
вул. Оборонна, 2, м. Луганськ, 91011. Тел./факс: (0642) 58-03-20.
alma-mater@list.ru
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 3459 від 09.04.2009 р.